

А.И. АНСЕЛЬМ

ОЧЕРКИ
РАЗВИТИЯ
ФИЗИЧЕСКОЙ
ТЕОРИИ
В ПЕРВОЙ ТРЕТИ
XX
ВЕКА



А. И. АНСЕЛЬМ

**ОЧЕРКИ РАЗВИТИЯ
ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ
В ПЕРВОЙ ТРЕТИ XX ВЕКА**



**МОСКВА «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

1986

ББК 22.3г
А 71
УДК 530.1 (09)

Ансельм А. И. Очерки развития физической теории в первой трети XX века. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986.—248 с., ил.

В книге изложены некоторые фундаментальные работы по квантовой теории, специальной теории относительности, квантовой механике и квантовой статистике, появившиеся в первой трети XX века. Изложение близко следует оригинальным работам, что позволяет почувствовать неповторимую атмосферу того бурного периода развития физики. Книга посвящена не столько истории, сколько рассмотрению эволюции основных идей физики этого периода. Автор разделяет высказывавшуюся крупными авторитетами точку зрения, что подлинное понимание физических теорий возможно только на этом пути.

Для научных работников, аспирантов и студентов, а также преподавателей естественно-научных специальностей, интересующихся историей современной физики и путями развития науки.

Табл. 2. Ил. 15. Библиогр. 120 назв.

Рецензенты:

доктор физико-математических наук *Л. И. Пономарев*
кандидат физико-математических наук *В. П. Визгин*

А 1704020000—058
053(02)-86 99-85

© Издательство «Наука».
Главная редакция
физико-математической
литературы, 1986

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Введение. Состояние физики к концу XIX века	7
Глава I. Начало квантовой теории	14
1. Квантовая теория черного излучения	14
2. Гипотеза световых квантов	19
3. Становление квантовой теории света	23
4. Распространение квантовой теории на молекулярное движение	31
Глава II. Специальная теория относительности	34
1. Электродинамика в период, предшествующий созданию специальной теории относительности	34
2. Специальная теория относительности Эйнштейна	36
3. Уравнения релятивистской механики	52
4. Эквивалентность массы и энергии	56
5. Формулировка специальной теории относительности с помощью четырехмерной геометрии. Четырехмерный мир Минковского	58
Глава III. Проблема существования атомов	65
1. Теория броуновского движения	66
2. Опыты над броуновским движением	71
Глава IV. Нуклеарная (ядерная) структура атома	74
1. Рассеяние альфа-частиц ядрами тяжелых элементов	75
2. Определение заряда ядра из исследований рентгеновских спектров	80
Глава V. Квантовая теория строения атомов по Бору — Зоммерфельду	84
1. Квантовая теория Бора атома водорода	84
2. Эллиптические орбиты электрона в атоме водорода	91
3. Пространственное квантование	94
4. Многоэлектронные атомы. Периодическая система элементов	98
5. Эффект Зеемана	103
6. Принцип Паули и спин электрона	107
Глава VI. Попытки обоснования квантовой механики Бора — Зоммерфельда	110
1. Принцип соответствия	110
2. Теория адиабатических инвариантов	111
Глава VII. Волны материи и квантовая статистика	116
1. Волны де Бройля	116
2. Применение статистики Бозе к фотонам	118
3. Идеальный газ по статистике Бозе — Эйнштейна	121
4. Статистика Ферми	124
Глава VIII. Рождение квантовой механики	130
1. Теория дисперсии	130
2. Квантовая механика Гейзенберга	132
3. Матричная формулировка квантовой механики	138

Глава IX. Дальнейшее развитие квантовой механики. Волновая механика Шредингера	149
1. Вариационный вывод волнового уравнения и его применение к атому водорода	150
2. «Геометрическая» и «волновая» механика	153
3. Непрерывный переход от микро- к макромеханике	158
4. Связь между механикой Гейзенберга — Борна — Иордана и механикой Шредингера	159
5. Теория возмущений и штарк-эффект линий Бальмера	163
6. Волновое уравнение в нестационарном случае и при наличии магнитного поля	164
7. Комбинационное рассеяние света	168
Глава X. Физическая интерпретация квантовой механики	170
1. Вероятностное толкование волновой функции	170
2. Соотношение неопределенностей Гейзенберга	172
3. Дискуссии между Эйнштейном и Бором о проблемах теории познания в атомной физике	175
Глава XI. Некоторые принципиальные применения квантовой механики	180
1. Квантовая механика атома гелия	180
2. Молекула водорода	188
3. Туннельный эффект и теория α -распада	193
4. О квантовой механике электронов в кристаллической решетке	199
Глава XII. Новые аспекты квантовой механики	208
1. Элементы квантовой электродинамики	208
2. Нерелятивистская квантовая механика спина электрона	216
3. Релятивистская квантовая теория электрона	220
4. Экспериментальное обнаружение позитронов	227
5. Экспериментальное обнаружение нейтронов	230
6. Дальнейшие пути развития физической теории	231
Список литературы	242

ПРЕДИСЛОВИЕ

1

Настоящая книга посвящена изложению основных, фундаментальных идей физики в первой трети XX века; конкретнее, в ней анализируется становление квантовой теории, специальной теории относительности, квантовой механики и квантовой статистики *).

К концу XIX века достигли принципиального завершения классическая механика, термодинамика, теория электромагнитного поля, кинетическая теория газов и классическая статистическая физика. Первая треть XX века была эпохой революционных преобразований в физике, возникновения новых понятий, можно сказать, нового мировоззрения.

Идея написать такую книгу возникла у меня по двум причинам. Во-первых, я думаю, что только историческое изложение развития физики дает подлинное понимание ее идей и теории. Известный математик и физик-теоретик Б. Ван дер Варден по этому поводу пишет **): «Можно, наконец, пользоваться историческим методом и шаг за шагом воспроизводить ход мыслей теоретиков в той мере, в какой это позволяют их работы. По моему мнению, полного понимания физической теории можно достичь, лишь следуя историческому методу. Этот метод позволяет нам судить, насколько та или иная гипотеза необходима для объяснения определенного круга явлений, можно ли ее видоизменить и каковы пределы ее применимости».

Аналогичной точки зрения придерживался Эйнштейн; вот что он сказал в беседе Р. С. Шэнкленду ***): «Нужно найти такой способ изложения (истории науки — А. А.), который показал бы процесс мышления, который привел к открытию». Эйнштейн чувствует, что историей развития идей в науке пренебрегают. И далее: «... не интересна история фактов, — когда, кто это сделал и т. д., волнует эволюция идей».

Во-вторых, я заметил, что когда на молодых людей, изучающих современную физику, обрушивается огромное количество фактов, сообщаемых им в обширных курсах, они совершенно теряются и, как говорится, перестают «из-за деревьев лес видеть». Между тем число фундаментальных, основных идей в современной физике совсем не столь обширно. Конечно, эти идеи совсем не просты, наоборот, они весьма сложны, но обозримы.

Разделение работ на фундаментальные и нефундаментальные несколько условно. Например, теорию теплоемкости твердого тела Эйнштейна я причисляю к фундаментальным работам, а теорию теплоемкости твердого тела Дебая и

*) По ряду причин мы не будем рассматривать общую теорию относительности.

***) Теоретическая физика 20 века / Под ред. М. Фирца, В. Вайскопфа. — М.: ИЛ, 1962, с. 231.

***) Шэнкленд Р. — УФН, 1965, т. 87, вып. 4, с. 711.

Борна — Кармана — к нефундаментальным, хотя и считаю последние работы превосходными. Причина, по которой я так поступаю, будет ясна из дальнейшего изложения.

Вообще выбор работ, рассматриваемых в книге, по неизбежности является несколько произвольным. Отбор материала в самих работах тоже носит субъективный характер. В какой мере мне удалось при этом решить поставленные перед собой задачи, пусть судит читатель.

Хотя моя книга не является популярной, но надеюсь — удобочитаемая; по своему стилю она близка к книге Э. Уиттекера [1], посвященной развитию физики, начиная от Ф. Бэкона и Декарта до Гейзенберга и Шредингера. Однако акценты, расставляемые Уиттекером при изложении материала, представляются мне не всегда правильными: так при изложении специальной теории относительности он полностью игнорирует роль Эйнштейна в ее создании, приписывая все Пуанкаре и Лорентцу. Достаточно сказать, что соответствующая глава называется у него «Специальная теория относительности Пуанкаре и Лорентца». Эта позиция Уиттекера, возможно, связанная с тем, что по своей специальности он был математиком и механиком, вызвала решительное возражение ряда физиков, на чем мы останавливаться не будем, сославшись на обстоятельное рассмотрение вопроса в книге В. Л. Гинзбурга [26]. Кроме того, Уиттекер во втором томе своего обширного труда рассматривает период с начала XX века только до 1926 г.

В книге Ф. Хунда [22] излагается и обсуждается с современной точки зрения история квантовой теории в большом отрыве от конкретного содержания оригинальных работ.

Следует еще упомянуть обстоятельную книгу М. Джеммера «Эволюция понятий квантовой механики» [120]. В ней чрезвычайно тщательно рассматриваются основные понятия и закономерности квантовой механики и их трактовка в основном с позиций «копенгагенской школы».

В настоящей книге материал излагается так, как он рассмотрен в соответствующих оригинальных работах. Делается только попытка изложить его максимально понятно. В этом смысле книгу можно рассматривать как своеобразное учебное пособие по фундаментальным оригинальным работам.

При ссылках и цитировании я часто обращаюсь не к первоисточникам. Я не столько стремился к скрупулезной исторической точности, сколько к воспроизведению научной атмосферы соответствующего времени.

В заключение я выражаю свою благодарность В. И. Перелю за просмотр части рукописи и ценные замечания, Д. И. Паршину за проработку всей рукописи и содействие в устранении ряда неясностей и ошибок, А. А. Ансельму за составление последнего раздела книги, посвященного описанию пути развития физики элементарных частиц, и И. Г. Арсеньевой за добросовестное и терпеливое оформление рукописи и работу над корректурой.

СОСТОЯНИЕ ФИЗИКИ К КОНЦУ XIX ВЕКА

К концу XIX века были, в принципе, завершены крупные разделы физики: классическая механика, начало которой было положено Галилеем в XVI и Ньютоном в XVII веке, термодинамика с ее двумя началами — законом сохранения энергии и законом возрастания энтропии (Майер, Гельмгольц, Клаузиус, Кельвин), теория электромагнитного поля Фарадея — Максвелла и кинетическая теория газов с классической статистической физикой (Клаузиус, Максвелл, Больцман, Гиббс).

Больших успехов добилась классическая механика. В соединении с законом тяготения Ньютона она с огромной точностью объяснила все особенности движения небесных тел. Равновесие и движение машин и механизмов, созданных руками человека, тоже подчинялись законам классической механики. Простые и естественные предположения позволили распространить механику на движение непрерывных сред: газов, жидкостей и упругих тел; это безгранично расширило возможности техники. Казалось, что законы классической механики имеют универсальный характер, т. е. могут быть применены ко всем телам при любом характере их движения.

Другая обширная область физики возникла при изучении электрических и магнитных явлений. Теория электромагнитного поля Фарадея — Максвелла не только объяснила все стационарные и квазистационарные явления электромагнетизма, но и предсказала существование электромагнитных волн, которые могут распространяться в пустом пространстве. Генрих Герц обнаружил их на опыте, и тем самым была прочно обоснована гипотеза об электромагнитной природе света.

Казалось, что длительный спор между корпускулярной и волновой теориями света решен в пользу последней.

Больших успехов достигла термодинамика, т. е. учение о взаимных превращениях разных видов энергии в работу. Установленные на опыте законы сохранения энергии и возрастания энтропии, при стремлении системы к равновесию, позволили создать стройную теорию энергетических превращений, приложимую как к широкому кругу явлений природы, так и к технике.

Параллельно созданию феноменологической термодинамики развилась кинетическая теория материи, основанная на предположении о существовании атомов. Особенно выдающуюся роль в развитии кинетической теории газов сыграли Рудольф Клаузиус, Джеймс Максвелл и Людвиг Больцман. Американский физик Уиллард Гиббс, используя общие положения статистической физи-

ки, дал обоснование равновесным законам феноменологической термодинамики.

Создалась странная ситуация: в то время, как само существование атомов подвергалось рядом крупных ученых сомнению, кинетическая теория газов развивалась все шире и глубже. Особенно впечатляющим был результат вычисления вязкости газов η , которая оказалась равной [2, с. 399]

$$\eta = \rho \bar{v} l / 3,$$

где ρ — плотность газа, v — средняя скорость его молекул и l — длина их свободного пробега. Так как ρ прямо пропорционально, а l обратно пропорционально концентрации молекул, то вязкость η не должна зависеть от плотности газа. Этот вывод показался Максвеллу настолько парадоксальным, что он собственноручно проверил его на опыте.

Интересно отметить, что, измеряя вязкость газа η и используя простые, верные по порядку величины соотношения, можно приближенно определить постоянную Авогадро N_A , т. е. число молекул в моле любого вещества.

В самом деле, средняя квадратичная скорость атомов \bar{v}^2 массы m может быть определена из закона равнораспределения энергии по степеням свободы: $m\bar{v}^2/2 = (3/2)kT$; поэтому $\bar{v}^2 = 3kT/m = 3RT/\mu$, где $R = N_A k$ — газовая постоянная, $\mu = N_A m$ — молярная масса, а T — термодинамическая температура. Полагая теперь в выражении для вязкости η среднюю скорость \bar{v} равной $\sqrt{\bar{v}^2}$, получим

$$\eta = (\rho l / 3) \sqrt{3RT/\mu}.$$

Измеряя вязкость газа в состоянии с определенными ρ и T , можно определить длину свободного пробега l . Например, для кислорода, при комнатной температуре и атмосферном давлении, получается $l \approx 0,1$ мкм = 10^{-5} см.

С другой стороны, по порядку величины $l \approx 1/n\sigma$ [2, с. 395], где σ — сечение рассеяния, а $n = N_A/V$ — концентрация молекул газа (V — объем, занимаемый одним молем газа, в соответствующих условиях). Если считать, что в жидком (твердом) состоянии молекулы «плотно упакованы», то по порядку величины объем моля в жидком состоянии $V_{ж} \approx N_A \sigma^{3/2}$. Исключая теперь из трех последних равенств n и σ , получим для постоянной Авогадро $N_A \approx (V_{г}/V_{ж})^2 V_{г}/l^3$.

Как отмечает Перрен [3, с. 88], если проделать соответствующие вычисления для ртути, то получится $N_A \approx 4,4 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$, что только на 27 % меньше истинного значения.

В конце XIX века в физике был сделан ряд открытий, которые по своему характеру и дальнейшему развитию принадлежат скорее XX веку. Мы упомянем три таких открытия: электрона, рентгеновских лучей и радиоактивности. Однако большинству физиков казалось, что эти открытия могут быть объяснены на основе клас-

сической механики и статистики. В частности, лорд Кельвин в одной из лекций (1901 г.), описав впечатляющее развитие физики XIX века, отметил, что только «два облачка на ясном горизонте физики» омрачают ее стройную систему. Эти два облачка, по мнению Кельвина, были — неясность с вопросом о теплоемкости газов и опыт Майкельсона. Из этих двух «облачков» выросли квантовая теория*) и специальная теория относительности.

В чем же заключалась неясность с теплоемкостью газов? С одной стороны, к концу XIX века было установлено, что атом — сложная система, в состав которой входят электроны; еще более сложны по своей структуре молекулы. С другой стороны, Клаузиусом и Больцманом в весьма общем виде была доказана теорема о равномерном распределении энергии по степеням свободы. С этой точки зрения было совершенно непонятно, почему такие многочастичные системы, как атомы и тем более молекулы, часто ведут себя в газе, как материальные точки с тремя степенями свободы. Это находилось в полном противоречии с самыми общими положениями статистической физики, основанной на классической механике (см., например, [2, с. 171]). Известно, что выход из этого положения был найден благодаря квантовой теории, которая возникла на рубеже XX века.

Известно, что опыт Майкельсона был поставлен с целью определения движения Земли относительно неподвижного эфира, однако такого движения обнаружено не было. Потребовался полный пересмотр таких фундаментальных понятий, как пространство и время. Это было наиболее полно осуществлено Альбертом Эйнштейном в специальной теории относительности в 1905 г.

Нетрудно понять, как атомистика проникла в электричество. Уже Майклом Фарадеом было установлено, что при прохождении сквозь электродит 96 500 Кл электричества на электродах во всех случаях выделяется один моль одновалентного вещества. Так как моль любого вещества содержит одно и то же число молекул N_A (постоянная Авогадро), то каждый ион одновалентного вещества несет с собой электрический заряд $e = 96\,500/N_A$ Кл. Значение N_A , которым располагали физики из кинетической теории газов, давало для элементарного заряда $e \approx 6 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ $\approx 2 \cdot 10^{-19}$ Кл, что только на 25% больше заряда электрона.

Решающее значение в установлении существования электрона сыграли исследования прохождения тока сквозь разреженные газы. В 1859 г. Юлиус Плюккер открыл лучи, распространяющиеся прямолинейно и перпендикулярно к поверхности катода, которые Гольдштейн в 1876 г. назвал «катодными». В 1869 г. Иоганн Вильгельм Гитторф обнаружил их отклонение в магнитном поле, а в 1871 г. Кромвель Варли указал на то, что они заряжены отрицательно. Однако только в 1895 г. Жан Перрен и в 1897 г. Джозеф Джон Томсон точно установили, что катодные лучи представляют

*) Исторически квантовая теория выросла из проблемы черного излучения (см. гл. I, раздел I), но вопросы теплоемкости тоже потребовали привлечения квантовых представлений.

собой поток отрицательно заряженных частиц. Термин «электроны» для них был введен ирландским физиком Джонстоном Стоней в 1891 г.

Изучая отклонение катодных лучей в электрическом и магнитном полях, Дж. Дж. Томсон определил для электронов отношение заряда e к массе m ; он получил для e/m величину порядка $3 \cdot 10^{17}$ СГСЭ/г (мы сейчас знаем, что оно равно $5,307 \cdot 10^{17}$ СГСЭ/г). Так как заряд e был приближенно известен, то можно было определить массу электрона, которая оказалась примерно в 2000 раз меньше массы атома водорода.

Отношение e/m для катодных лучей получалось одинаковым при наполнении разрядной трубки любым газом. Естественно было поэтому предположить, что электроны входят в состав всех атомов. Это получило веское подтверждение в 1896 г., когда из теории Лорентца, объясняющей эффект Зеемана, на опыте было найдено то же отношение для e/m .

Так как атомы в целом нейтральны, то они должны содержать и положительный заряд, равный по модулю сумме зарядов электронов в атоме. Это естественно привело к различным моделям атомов. Наибольшей популярностью из них пользовалась модель атома, предложенная Дж. Дж. Томсоном, которую он развивал с 1897 по 1904 гг.

Из электростатики известно, что система точечных зарядов не может образовать статической пространственно устойчивой конфигурации (теорема Ирншоу, см. [4, с. 93]). Томсон предположил, что положительный заряд атома равномерно распределен по всему его объему, т. е. по шару радиусом порядка 10^{-8} см. Электроны же вкраплены в этот заряд и образуют устойчивые конфигурации. Колебания электронов около этих устойчивых конфигураций должны были давать атомные спектры.

Однако с помощью модели Томсона каких-либо успехов в объяснении атомных спектров физики не добились, что представляется естественным, поскольку структура атомов имеет принципиально квантовый характер.

Другое выдающееся открытие было сделано тоже в связи с изучением прохождения тока сквозь разреженные газы. Немецкий профессор Вильгельм Конрад Рентген из Вюрцбургского университета в ноябре 1895 г. обнаружил особое излучение, исходящее от той части разрядной трубки, на которую падают катодные лучи. Рентген обнаружил это явление, случайно заметив свечение бумаги, покрытой платиносиноеродистым барием, в то время как включенная газоразрядная трубка была плотно закрыта картонным футляром. Это излучение, которое Рентген назвал x -лучами, обладает огромной проникающей способностью. Оно слабо поглощается слоями бумаги, картоном, деревом, живой тканью. Сильно поглощается металлами, костями и вообще веществами более высокой плотности. Рентгену удалось сфотографировать закрытый деревянный футляр с гирьками, причем на фотографии явственно проступают изображения гирек. Он же получил первую

рентгенограмму руки, на которой ясно видны кости кисти руки. Было быстро осознано, какую огромную роль x -лучи, которые мы сейчас называем рентгеновскими, будут играть в медицине.

В течение полутора лет Рентген опубликовал три работы, посвященные исследованию открытых им лучей. Он понял, что рентгеновские лучи получаются в результате торможения электронов катодного пучка, поэтому сконструировал первую рентгеновскую трубку с антикатодом из вольфрама. Исследования Рентгена были посвящены главным образом изучению проникающей способности в образцах разной толщины и состава. Он показал также, что рентгеновские лучи не отклоняются в магнитном поле и, следовательно, не являются потоком заряженных частиц. Однако, исследуя волновые свойства лучей, Рентген не обнаружил их преломления и дифракции. Он высказал гипотезу, что рентгеновские лучи представляют собой продольные электромагнитные волны; то, что они представляют собой обычные поперечные волны очень малой длины было убедительно доказано только 17 лет спустя в опытах Лауэ. Рентген показал также, что рентгеновские лучи, проходя сквозь воздух, ионизируют его.

С открытием рентгеновских лучей тесно связано другое великое открытие конца XIX века — явление радиоактивности. В начале 1896 г., т. е. непосредственно после первой публикации Рентгена, парижский химик профессор Анри Беккерель заинтересовался рентгеновскими лучами и решил проверить, не связаны ли последние с явлением флюоресценции; в самом деле, ведь рентгеновские лучи испускались тем местом газоразрядной трубки, которое ярко флюоресцировало под действием катодных лучей. В качестве флюоресцирующего вещества Беккерель выбрал двойную сернокислую соль урана и калия. Беккерель быстро обнаружил, что флюоресценция не сопровождается рентгеновским излучением, но что существует какое-то другое проникающее излучение, которое действует на фотографическую пластинку, проходя сквозь слои бумаги, в которую завернута пластинка. Источником этого нового излучения, как установил Беккерель, является металл уран. Это новое излучение, которое стали называть «лучами Беккереля», подобно рентгеновскому, проходит через бумагу, дерево, тонкие слои металла, действует на фотографическую пластинку и ионизирует воздух.

В это же время в Париже работала молодая полька Мария Склодовская-Кюри, жена известного французского физика Пьера Кюри. Она заинтересовалась «лучами Беккереля» и правильно предположила, что открытое явление может быть присуще и другим химическим элементам. Вскоре она обнаружила, что металл торий тоже испускает «лучи Беккереля». (Это же явление было независимо обнаружено немецким химиком Г. Шмидтом.) Это свойство химических элементов — испускать «лучи Беккереля» — Мария Кюри назвала радиоактивностью (от латинского слова радиус — луч). Продолжая свои исследования над радиоактивностью, Мария Кюри обнаружила, на первый взгляд, странное

явление. Оказалось, что радиоактивность смоляной обманки — руды, из которой извлечен уран, — больше радиоактивности чистого урана в том количестве, которое содержалось в руде. Мария Кюри сделала отсюда правильный вывод, что смоляная обманка содержит какое-то вещество более радиоактивное, чем уран. Марии Кюри и ее мужу, который тоже включился в работу, удалось получить несколько тонн урановой руды, из которой уже был извлечен уран, и подвергнуть ее систематическому исследованию. В июле 1898 г. они обнаружили новый радиоактивный элемент, который в честь родины Марии Кюри они назвали полонием, а через полгода они открыли радиоактивный элемент в три миллиона раз более активный, чем уран, который они назвали радием. Вскоре другой французский физик, Андрэ Дебиерн, нашел еще один радиоактивный элемент, который он назвал актинием.

Наряду с открытием новых радиоактивных элементов физики исследовали природу «лучей Беккереля». Молодой английский физик Эрнест Резерфорд, ранее работавший в лаборатории Дж. Дж. Томсона в Кембридже, показал в 1898 г., что радиоактивное излучение состоит из двух сортов лучей, которые он назвал α и β , причем α -лучи поглощаются примерно в сто раз сильнее, чем β -лучи. В последующие 7—8 лет исследования супругов Кюри, Резерфорда, Вилларда и других полностью выяснили природу «лучей Беккереля». Исследования их отклонения в магнитном и электрическом полях показали, что β -лучи являются потоком быстрых электронов, а α -лучи — потоком положительно заряженных частиц, у которых отношение заряда к массе того же порядка, что и у водородных ионов. Вскоре было выяснено, что они несут двойной элементарный заряд и масса их равна массе атомов гелия. Наконец был обнаружен третий сорт излучения — γ -лучи, которые представляют собой электромагнитные волны, еще более жесткие, чем рентгеновские лучи.

Наверное, самым замечательным открытием при исследовании радиоактивности было то, что впоследствии получило название радиоактивных превращений.

В 1900 г. Э. Резерфорд, работая в университете Мак-Гилла в Монреале, обнаружил совместно с Р. Б. Оуэном аномальное поведение воздуха, окружающего радиоактивный торий. Резерфорд показал, что торий при радиоактивном распаде выделяет газ, который тоже радиоактивен. Этот газ, который он назвал эманацией тория, похож по своим химическим свойствам на благородные газы, однако обладает большей атомной массой, только ненамного меньшей атомной массы тория.

Было обнаружено важное свойство эманации тория: его радиоактивность со временем уменьшалась. Если I_0 — интенсивность радиоактивного излучения в начальный момент времени ($t=0$), то интенсивность в момент времени t была равна $I_t = I_0 \exp(-\lambda t)$, где λ — постоянная распада; отсюда легко показать, что среднее время жизни атома эманации тория равно $1/\lambda$. Это привело к представлению, что во всех случаях радиоактивного излучения имеет

место радиоактивное превращение атомов, но только в некоторых случаях среднее время их жизни очень велико. Действительно, для урана среднее время жизни оказалось равным $4,5 \cdot 10^9$ лет, а для тория — $1,65 \cdot 10^{10}$ лет, поэтому для них уменьшение радиоактивного излучения трудно наблюдаемо. Загадка, казалось бы, неиссякаемого источника их энергии была разрешена.

В 1900 г. известный английский физик Уильям Крукс показал, что чисто химическим путем можно из урана выделить новое, быстро распадающееся радиоактивное вещество, которое он назвал «уран Х».

Фредерик Содди, работавший с Резерфордом в Монреальском университете, в результате тщательного изучения радиоактивных образцов сделал вывод, что уран испускает только α -лучи, а уран Х — только β -лучи.

Так как α -частица обладает атомной массой 4 и зарядом $+2e$, а β -частица — пренебрежимо малой атомной массой и зарядом e , то Содди смог сформулировать следующее правило радиоактивного сдвига: при испускании α -частицы атомная масса элемента уменьшается на 4, а атомный номер уменьшается на две единицы, при испускании же β -частицы атомная масса остается без изменения, а атомный номер увеличивается на единицу.

Систематическое исследование радиоактивных превращений показало, что существует три радиоактивных семейства: урана, тория и актиния, каждое из которых состоит более чем из 10 членов, образующихся в результате последовательного испускания α - и β -частиц.

Ясно, что при таких испусканиях могут образоваться элементы одного атомного номера, следовательно, одинаковых химических свойств, но разной атомной массы. Такие элементы получили название изотопов. Позже выяснилось, что обычные, нерадиоактивные элементы таблицы Менделеева тоже, как правило, состоят из изотопов.

Хотя до 1911 г. не была доказана модель атома с центральным ядром, ответственным за радиоактивные превращения, многие явления радиоактивности были поняты и исследованы раньше. Оставалось, однако, совершенно непонятным, почему атомы определенного радиоактивного вещества распадаются по статистическому закону, т. е. некоторые — через секунды, а другие — через миллионы лет. Ответ на этот вопрос дала только квантовая механика.

НАЧАЛО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ЧЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В конце XIX столетия физики стали изучать распределение энергии в спектре равновесного, или черного, излучения.

Если нагреть до определенной температуры T стенки замкнутой полости, то они станут излучать тепловую (электромагнитную) энергию, которая в результате процессов поглощения и излучения стенками полости придет в состояние статистического равновесия.

Как показал Густав Кирхгоф, свойства этого равновесного, или черного, излучения зависят только от температуры T . Это обстоятельство послужило, вероятно, главной причиной интереса физиков к черному излучению.

Введем понятие о спектральной плотности энергии черного излучения $\rho_\nu(T)$, понимая под $\rho_\nu(T)d\nu$ энергию излучения в единице объема при температуре T в интервале частот от ν до $\nu+d\nu$. В силу отсутствия взаимодействия между электромагнитными волнами полная плотность излучения в единице объема равна

$$\rho(T) = \int_0^{\infty} \rho_\nu(T) d\nu. \quad (1.1)$$

Макс Планк показал [5, с. 287], что

$$\rho_\nu(T) = (8\pi\nu^2/c^3) u(\nu, T). \quad (1.2)$$

Здесь c — скорость света, $u(\nu, T)$ — средняя энергия атомного осциллятора частоты ν , находящегося в состоянии статистического равновесия с черным излучением при температуре T^* .

Известно, что по классической статистике средняя энергия атомного осциллятора

$$u(\nu, T) = kT, \quad (1.2a)$$

где k — постоянная Больцмана, поэтому

$$\rho_\nu(T) = (8\pi\nu^2/c^3) kT. \quad (1.3)$$

Это выражение получило название формулы Рэля—Джинса.

Измерения Рубенса и Курлбаума [6] показали, что формула (1.3) хорошо оправдывается в области малых частот. Однако при

* Физики не сразу осознали, что нормальные колебания электромагнитного поля в полости можно рассматривать как осцилляторы, находящиеся в состоянии статистического равновесия.

увеличении частоты она на опыте не оправдывается: с ростом ν ρ_ν достигает максимума, а при больших частотах убывает по экспоненциальному закону. Выражение (1.3) не может быть правильным уже потому, что, согласно (1.1), полная плотность излучения $\rho(T)$ стремится к бесконечности. Это обстоятельство получило название ультрафиолетовой катастрофы.

В 1893—94 гг. Вин вывел свой знаменитый закон смещения, согласно которому [5, с. 458]

$$\rho_\nu(T) = \nu^3 F(\nu/T), \quad (1.4)$$

где F — некоторая универсальная функция *). Для плотности энергии черного излучения Вин предложил эмпирическую формулу

$$\rho_\nu = a\nu^3 \exp(-b\nu/T), \quad (1.5)$$

где a и b — постоянные; выражение (1.5) удовлетворяет условию (1.4), имеет максимум, но хорошо описывает результаты опытов только в ультрафиолетовой области.

В результате к концу XIX века ситуация с объяснением законов черного излучения была в совершенно неудовлетворительном состоянии. Формула Рэлея—Джинса (1.3), следующая из общих принципов, правильно описывала спектр черного излучения только в области малых частот. Формула Вина (1.5) была теоретически не обоснована и хорошо описывала тот же спектр только в области больших частот.

В этот момент Планк предложил совершенно новую идею для объяснения черного излучения, положив начало квантовой теории.

Макс Планк родился 23 апреля 1858 г. в Киле в большой семье профессора гражданского права Кильского университета. В 1867 г. семья переехала в Мюнхен, где Планк закончил гимназию и поступил в университет. При выборе профессии Планк колебался между античной филологией, физикой и музыкой.

Профессор Мюнхенского университета Филипп Жоли пытался отсоветовать Планку заниматься физикой. По мнению Жоли, физика после установления закона сохранения энергии не сулила новых интересных открытий. К счастью, Планк не последовал его совету.

В 1877 г. Планк переехал в Берлин, чтобы закончить свое университетское образование; здесь он слушал лекции по теоретической физике Густава Кирхгофа и Германа Гельмгольца. По собственному признанию Планка, лекции в Мюнхенском и Берлинском университетах не оказали сильного влияния на его интересы и образование, которое он в основном получил благодаря чтению книг.

В 1885 г. Планк стал экстраординарным профессором Кильского университета. В 1889 г. он был приглашен в Берлин на кафедру (после Кирхгофа), на которой стал ординарным профессором в 1893 г. и членом Прусской академии наук в 1894 г. В Берлине он оставался до конца своей жизни.

Первые работы Планка относятся к термодинамике; с 1886 г. заинтересовался термодинамикой излучения абсолютно черного тела, в 1900 г. доказал, что испускание происходит скачкообразно, порциями, которые были названы квантами.

*) Отметим, что выражение (1.3) удовлетворяет закону смещения Вина (1.4).

В 1918 г. за открытие кванта действия удостоен Нобелевской премии по физике; в 1926 г. был избран иностранным членом АН СССР.

Планк был горячим патриотом своей родины и убежденным антифашистом. Он с большой смелостью выступал, уже в период фашизма, в защиту Эйнштейна. Разъяренный Гитлер бросил как-то Планку в лицо, что только преклонный возраст спасает его от концентрационного лагеря.

Планк пережил все ужасы второй мировой войны и умер в Геттингене в октябре 1947 г., достигнув почти девяностолетнего возраста.

19 октября 1900 г. Планк выступил в Немецком физическом обществе в Берлине с докладом «Об улучшении формулы Вина для спектрального распределения» [7, 8]. Используя доказательство Кирхгофа о том, что свойства черного излучения не зависят от вещества стенок полости, Планк ввел набор атомных осцилляторов различной частоты ν .

Применяя к осциллятору, находящемуся в состоянии термодинамического равновесия, первое начало термодинамики и считая объем системы постоянным (твердое тело), имеем

$$du = T ds, \quad (1.6)$$

где s — энтропия осциллятора, а u — его средняя энергия, входящая в правую часть выражения (1.2). Из (1.2) и формулы Вина (1.5), имеем

$$u = (ac^3/8\pi) \nu \exp(-b\nu/T). \quad (1.7)$$

Решая это уравнение относительно T , подставляя в (1.6), получим

$$ds/du = 1/T = (1/b\nu) \ln(ac^3\nu/8\pi u),$$

откуда

$$d^2s/du^2 = -(1/b\nu)(1/u). \quad (1.8)$$

Сам Планк в своей «Научной автобиографии» по этому поводу пишет [9, с. 16]: «Так как для необратимости процесса обмена энергией между некоторым осциллятором и возбужденным им излучением определяющее значение имеют производные энтропии осциллятора по его энергии, то я подсчитал значение этой величины для того случая, когда для распределения энергии справедлив закон Вина, находившийся тогда в центре внимания, и пришел к тому замечательному результату, что в этом случае обратная величина указанной производной пропорциональна энергии».

Нетрудно видеть, что в случае закона Рэлея—Джинса (1.2а), подставляя из него T в (1.6), мы вместо (1.8) получим

$$d^2s/du^2 = -k\nu^2. \quad (1.9)$$

Для того чтобы получить лучшую формулу, Планк решил «подправить» выражение (1.8), следующее из закона Вина; он положил

$$d^2s/du^2 = -k/u(kb\nu + u). \quad (1.10)$$

При больших частотах ($kb\nu \gg u$) (1.10) переходит в (1.8), при малых частотах ($kb\nu \ll u$) (1.10) переходит в (1.9).

Вот как сам Планк пишет по этому поводу: «Среди всех предлагаемых выражений одно заслуживает особенного внимания; оно по простоте наиболее близко формуле Вина и, поскольку последняя недостаточна для описания всех наблюдений, по-видимому, достойно внимательного рассмотрения. Это выражение получается, если воспользоваться (1.10)». И далее Планк делает примечание: «Я исхожу из второй производной от s по u , так как эта величина имеет простой физический смысл» (здесь Планк ссылается на свою предыдущую работу — А. А.).

Интегрируя (1.10), получим

$$ds/du = 1/T = (1/bv) \ln[(kbv + u)/u] + \text{const.}$$

При $T \rightarrow \infty$ левая часть равенства стремится к нулю, средняя энергия u будет неограниченно возрастать, так что $\ln[\dots]$ в правой части равен нулю; таким образом, аддитивное второе слагаемое в правой части тоже равно нулю ($\text{const} = 0$). Решая последнее уравнение относительно u , получим

$$u = \frac{kbv}{e^{bv/T} - 1}. \quad (1.11)$$

Если ввести, как это сделал Планк, вместо постоянной b постоянную $h = kb$, то из (1.2) и (1.11) для энергии черного излучения следует формула Планка

$$\rho_\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1.12)$$

с двумя константами h и k , которые могут быть определены из сравнения с опытом*). Сравнение (1.12) с измерениями Луммера и Принсгейма [10], Рубенса и Курлбаума [6] и Пашена [11] показало, что это выражение весьма точно описывает спектр черного излучения.

Для постоянных, входящих в (1.12), Планк получил из сравнения с опытом наиболее вероятные значения:

$$h = 6,885 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}, \quad k = 1,429 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К.}$$

Согласно современным данным,

$$h = 6,626 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}, \quad k = 1,381 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К.}$$

Так как постоянная Больцмана равна $k = RN_A$, где $R = 8,31 \cdot 10^7$ эрг/К — газовая постоянная, а N_A — постоянная Авогадро, то Планк с малой для его времени погрешностью (порядка 4%) смог определить постоянную Авогадро. Кроме того, произведение eN_A равно постоянной Фарадея $F: eN_A = F = 28,95 \cdot 10^{13}$ СГСЭ/моль, поэтому Планк смог также определить элементарный заряд e .

Планк, конечно, понимал, что (1.12) не более чем эмпирическая формула, хорошо совпадающая с опытом. Однако совпадение было настолько впечатляющим, что Планк стал искать теоретическое обоснование выражения (1.12).

*) Мы считаем, что нам неизвестно числовое значение постоянной Больцмана k .

Меньше чем через два месяца, 14 декабря, Планк вновь выступил в Немецком физическом обществе с докладом: «К теории закона распределения энергии в нормальном спектре» [12, 8]. В этом сообщении он дал обоснование выражения (1.12) на совершенно новой, находящейся в противоречии с классическими представлениями основе. Этот день можно считать днем рождения квантовой теории.

В своем втором сообщении Планк рассматривает набор атомных осцилляторов, находящихся в полости черного излучения в равновесии с ним. Пусть N атомных осцилляторов обладают частотой ν , N' — частотой ν' и т. д. Пусть энергия E распределена среди N осцилляторов дискретными порциями энергии ϵ , так что каждый осциллятор обладает энергией $n\epsilon$, где n — целое число. Если по N осцилляторам распределено всего P дискретных порций энергии ϵ , то $E = P\epsilon$. Эти P дискретных порций энергии могут быть распределены по N осцилляторам различным образом. Каждое такое распределение называется комплексией. Для определения энтропии атомного осциллятора Планк решил воспользоваться идеей Больцмана о пропорциональности энтропии логарифму числа комплексий. При подсчете числа комплексий Планк проявляет замечательную физическую интуицию. Под разными комплексиями Планк понимает только те, которые отличаются набором и последовательностью целых чисел n . Тем самым Планк предвосхитил принцип неразличимости квантовых частиц, ведущий к статистике Бозе—Эйнштейна. Из комбинаторики (разложение P неразличимых шаров по N ящикам) следует, что число комплексий равно

$$W_N^P = \frac{(N + P - 1)!}{(N - 1)! P!}. \quad (1.13)$$

То же выражение получается для числа комплексий в статистике Бозе—Эйнштейна, если под P понимать число неразличимых частиц, а под N — число ячеек в энергетическом слое [2, с. 419]. Энтропия этих N атомных осцилляторов связана, по Больцману [2, с. 100], числом комплексий, или термодинамической вероятностью, W_N^P соотношением

$$S_N^P = k \ln W_N^P = k [\ln(N + P - 1)! - \ln(N - 1)! - \ln P!], \quad (1.14)$$

где k — постоянная Больцмана. Используя упрощенную формулу Стирлинга: $\ln x = x \ln x - x$, справедливую для больших чисел x , получим из (1.14)

$$S_N^P = k [(N + P) \ln(N + P) - N \ln N - P \ln P], \quad (1.15)$$

где мы еще пренебрегли 1 по сравнению с большими числами N и P .

Среднее число дискретных порций энергии ϵ на один осциллятор равно $u/\epsilon = P/N$, откуда $P = Nu/\epsilon$; подставляя это значение P в (1.15), получим для энтропии одного осциллятора в равновесии

$$s = S_N^P / N = k [(1 + u/\epsilon) \ln(1 + u/\epsilon) - (u/\epsilon) \ln(u/\epsilon)]. \quad (1.16)$$

Отсюда и из (1.6) вытекает, что

$$ds/du = 1/T = (k/\varepsilon) \ln[(\varepsilon + u)/u]. \quad (1.17)$$

Решая это уравнение относительно u , получим

$$u = \frac{\varepsilon}{(e^{\varepsilon/kT} - 1)}, \quad (1.18)$$

что соответствует (1.12), если положить, удовлетворяя (1.4),

$$\varepsilon = h\nu, \quad (1.19)$$

где h — некоторая постоянная. Мы видим, что энергия осциллятора может принимать только дискретные значения:

$$\varepsilon_n = nh\nu. \quad (1.20)$$

Таким образом, если изменение энергии осциллятора частоты ν может происходить только дискретными порциями $h\nu$ и число комплексов (1.13) определено на основании изложенных выше соображений, то средняя энергия осцилляторов разных частот, а следовательно, и энергия черного излучения, находящаяся с ними в равновесии, распределены по закону (1.18), т. е. в соответствии с формулой Планка (1.12), находящейся в полном согласии с опытом. Конечно, этот результат полностью противоречил классическим представлениям.

Следует отметить, что классическое распределение Больцмана тоже может быть получено посредством разбиения фазового пространства на ячейки конечного объема, соответствующие определенной «размазанности» по энергии; однако результат не зависит от объема ячеек [13].

2. ГИПОТЕЗА СВЕТОВЫХ КВАНТОВ

После работы Планка о черном излучении, изложенной в предыдущем разделе, физики, в том числе и сам Планк, тщетно пытались примирить новую точку зрения с принципами классической физики. Физики еще не были подготовлены к пониманию ограниченной применимости фундаментальных понятий и законов, т. е. к принципу соответствия в широком смысле слова.

В 1905 г. на горизонте появилась новая звезда — 26-летний физик Альберт Эйнштейн.

Альберт Эйнштейн родился 14 марта 1879 г. в Ульме (сейчас город в ФРГ). Через год после рождения Эйнштейна семья переехала в Мюнхен, где его отец стал владельцем небольшой электротехнической фабрики.

С 14 лет Эйнштейн жил в Швейцарии, где окончил кантональную среднюю школу в Аарау. В 1896 г. он поступил в Политехнический институт в Цюрихе, который окончил в 1900 г. Эйнштейн не был отмечен преподавателями института и поэтому не был оставлен при нем для подготовки к профессорской деятельности. В течение двух лет он вел частную преподавательскую работу, которая плохо обеспечивала его материально. В 1902 г. благодаря рекомендации отца своего друга М. Гроссмана он был зачислен в Берне в Бюро патентов. Имея постоянное обеспечение, Эйнштейн смог все свободное время отдавать ис-

исследовательской работе. Здесь он создал и опубликовал в 1905 г. ряд выдающихся работ по физике.

В 1909 г. Эйнштейн был приглашен профессором теоретической физики в Цюрихский университет, откуда в 1911 г. перешел в Немецкий университет в Праге. В 1912 г. он вернулся в Цюрих в Политехнический институт. Наконец, в 1913 г. Эйнштейн, по инициативе Планка, был избран членом Прусской академии наук и профессором Берлинского университета. В 1914 г. Эйнштейн переехал в Берлин, где провел 18 лет, до 1933 г., когда в Германии к власти пришли фашисты.

Именно здесь, в Берлине, Эйнштейн создает свое величайшее научное творение — общую теорию относительности. Берлинский период был омрачен для Эйнштейна нападениями на него немецких шовинистов и антисемитов, среди которых были и такие выдающиеся физики, как нобелевские лауреаты Штарк и Ленард. Эйнштейн подвергался травле и как ученый, и как еврей, и как пацифист. Конечно, основная масса немецких физиков энергично поддерживала Эйнштейна. Фашизм и Эйнштейн были абсолютно несовместимы. В 1933 г. он был вынужден выйти из Прусской академии наук. В том же году его лишили германского подданства. Он принял предложение поселиться в США, и с 1933 г. до конца своей жизни, т. е. до 1955 г., Эйнштейн жил в Принстоне, состоя профессором Института высших исследований.

Эйнштейн — член многих академий наук, в частности иностранный член АН СССР с 1926 г.

Эйнштейн был не только гениальным ученым, равным по своему значению Галилею и Ньютону, но прежде всего мудрым и гуманным человеком. Его жизнь не может быть представлена в коротких строках, поэтому я сошлюсь на его биографию *) и воспоминания о нем **).

Эйнштейн выступил в 1905 г. с тремя работами: теорией относительности, теорией броуновского движения и гипотезой световых квантов, каждая из которых была достойна Нобелевской премии.

Сейчас мы рассмотрим только последнюю работу, опубликованную Эйнштейном под скромным названием «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света» [14] (рус. пер. [15, т. III, с. 92]). За эту работу Эйнштейну была присуждена в 1921 г. Нобелевская премия.

Эйнштейн с полной ясностью формулирует выдвинутую им гипотезу световых квантов. Во введении к работе он пишет:

«Поэтому, несмотря на полное подтверждение экспериментом теории дифракции, отражения, преломления, дисперсии и так далее, может оказаться, что теория света, оперирующая непрерывными пространственными функциями (т. е. волновая теория — А. А.), приведет к противоречию с опытом, когда ее будут применять к явлениям возникновения и превращения света.

Я и в самом деле думаю, что опыты, касающиеся «излучения черного тела», фотолюминесценции, возникновения катодных лу-

*) Зелиг К. Альберт Эйнштейн. — М.: Атомиздат, 1964. Хофман Б. Альберт Эйнштейн — творец и бунтарь. — М.: Прогресс, 1983.

**) Инфельд Л. Эйнштейн и современная физика. — М.: Гостехиздат, 1956, с. 197.

чей при освещении ультрафиолетовыми лучами и других групп явлений, связанных с возникновением и превращением света, лучше объясняются предположением, что энергия света распределена по пространству дискретно».

После обсуждения ряда вопросов Эйнштейн приступает к вычислению энтропии черного излучения.

Рассмотрим черное излучение, занимающее объем V ; его энтропия S может быть представлена в виде

$$S = V \int_0^{\infty} \varphi_{\nu}(\rho_{\nu}) d\nu, \quad (2.1)$$

поскольку энтропия равновесной системы может быть выражена через объем и энергию [2, с. 109]. Здесь $\rho_{\nu} d\nu$ — энергия и $\varphi_{\nu} d\nu$ — энтропия в единице объема излучения в интервале частот $(\nu, \nu + d\nu)$. Такое спектральное разложение энтропии возможно из-за отсутствия взаимодействия волн электромагнитного поля. Для черного излучения энтропия при заданной энергии максимальна; тогда если $V = \text{const}$, то

$$\delta \int_0^{\infty} \varphi_{\nu}(\rho_{\nu}) d\nu = 0 \quad (2.2)$$

при

$$\delta \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu = 0. \quad (2.3)$$

Дополнительное условие постоянства энергии (2.3) можно учесть, умножая (2.3) на неопределенный множитель Лагранжа λ ; тогда вместо (2.2) и (2.3) получим

$$\int_0^{\infty} \left(\frac{\partial \varphi_{\nu}}{\partial \rho_{\nu}} - \lambda \right) \delta \rho_{\nu} d\nu = 0. \quad (2.4)$$

Так как $\delta \rho_{\nu}$ произвольно, то отсюда следует, что производная

$$\partial \varphi_{\nu} / \partial \rho_{\nu} = \lambda, \quad (2.5)$$

т. е. не зависит от частоты (поскольку постоянный множитель Лагранжа не зависит от переменной интегрирования ν).

Вычислим приращение энтропии dS при постоянном объеме $V = \text{const}$, когда температура обратимым образом изменилась на dT ; из (2.1) получим

$$\begin{aligned} dS &= V \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial \varphi_{\nu}}{\partial \rho_{\nu}} d\rho_{\nu} \right) d\nu = \frac{\partial \varphi_{\nu}}{\partial \rho_{\nu}} V \int_0^{\infty} (d\rho_{\nu}) d\nu = \\ &= \frac{\partial \varphi_{\nu}}{\partial \rho_{\nu}} d \left(V \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu \right) = \left(\frac{\partial \varphi_{\nu}}{\partial \rho_{\nu}} \right) dE, \quad \text{где } E = V \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu ; \end{aligned}$$

при этом мы воспользовались независимостью производной (2.5) от ν . Так как процесс является обратимым и объем постоянен, то dE равно подведенному теплу, поэтому $dE = T dS$. Отсюда и из предыдущего равенства следует, что

$$\partial\Phi_\nu/\partial\rho_\nu = 1/T. \quad (2.6)$$

Далее, используем закон Вина (1.5), хорошо оправдывающийся на опыте для больших значений ν/T . (В связи с этим Эйнштейн подчеркивает, что «наши результаты будут справедливыми только в известных пределах».) Определяя из закона Вина $1/T$ и подставляя в (2.6), получим

$$\partial\Phi_\nu/\partial\rho_\nu = -(1/b\nu) \ln(\rho_\nu/a\nu^3).$$

Интегрируя и учитывая, что $\Phi_\nu = 0$ при $\rho_\nu = 0$, находим

$$\Phi_\nu(\rho_\nu) = -(\rho_\nu/b\nu) [\ln(\rho_\nu/a\nu^3) - 1]. \quad (2.7)$$

Рассмотрим в объеме V излучение частоты ν ; его энергия E_ν (на единичный интервал частоты ν) равна $E_\nu = V\rho_\nu$. Энтропия этого излучения равна

$$S_\nu = V\Phi_\nu = -(E_\nu/b\nu) [\ln(E_\nu/aV\nu^3) - 1]. \quad (2.8)$$

Рассмотрим равновесное излучение той же энергии E_ν в другом объеме V_0 . Очевидно, его энтропия

$$S_\nu^0 = V_0\Phi_\nu = -(E_\nu/b\nu) [\ln(E_\nu/aV_0\nu^3) - 1]. \quad (2.9)$$

Разность энтропий равна

$$S_\nu - S_\nu^0 = k \ln(V/V_0)^{E_\nu/h\nu}, \quad (2.10)$$

где мы, как и в (1.12), заменили b на h/k . Из принципа Больцмана [2, с. 100] следует, что разность энтропий состояний 1 и 2 пропорциональна натуральному логарифму отношения числа комплексий этих состояний, т. е. логарифму относительной вероятности состояния 1 к 2. Из (2.10) вытекает, что эта относительная вероятность равна

$$(V/V_0)^{E_\nu/h\nu}. \quad (2.11)$$

Рассмотрим теперь идеальный газ, состоящий из N молекул в объеме V_0 , и определим вероятность того, что все N молекул в некоторый момент времени случайно соберутся в объеме $V < V_0$. Очевидно, эта вероятность, в силу независимости движения молекул, равна $(V/V_0)^N$. Сравнивая эту вероятность с (2.11), мы видим, что [15, т. III] «Монохроматическое излучение малой плотности в пределах области применимости закона излучения Вина (это ограничение, на самом деле, не существенно — А.А.) в смысле теории теплоты ведет себя так, как будто оно состоит из независимых друг от друга квантов энергии величиной $h\nu$ ».

И далее Эйнштейн спрашивает: «Напрашивается вопрос, не является ли закон возникновения и превращения света таким, как будто свет состоит из подобных же квантов энергии?».

Восьмой параграф статьи называется: «О возбуждении катодных лучей при освещении твердых тел». Сейчас мы назвали бы этот параграф «Внешний фотоэффект с металлов». Эйнштейн отмечает, что объяснение явлений фотоэффекта на основе волновой теории сталкивается с особенно большими трудностями, изложение которых можно найти в известной работе Ленарда [16]. Главная трудность заключалась в том, что было непонятно, почему максимальная скорость фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света; ведь интенсивность света в электромагнитной волне пропорциональна квадрату амплитуды электрического поля, которое непосредственно действует на электрон.

Эйнштейн рассматривает случай, когда квант энергии $h\nu$ целиком поглощается электроном в приповерхностном слое катода и электрон вылетает из него, совершая работу выхода A . Если e — заряд электрона, V — задерживающий потенциал, а eV — максимальная кинетическая энергия вылетающих электронов, то

$$eV = h\nu - A. \quad (2.12)$$

Это и есть знаменитое уравнение Эйнштейна для фотоэффекта! Из него сразу вытекает, что если экспериментально определять зависимость V от частоты возбуждающего света ν , то должны получиться прямые с наклоном, равным h/e , независимым от материала катода.

Далее Эйнштейн пишет: «Насколько мне известно, наше представление о фотоэлектрических процессах не противоречит наблюдениям Ленарда. Если квант возбуждающего света отдает свою энергию независимо от всех прочих квантов, то распределение электронов по скорости... не должно зависеть от интенсивности возбуждающего света; с другой стороны, количество электронов, покидающих тело при прочих равных условиях должно быть пропорционально интенсивности возбуждающего света» (так как интенсивность света пропорциональна числу квантов — $A \cdot A$).

Опыты, проведенные различными исследователями, показали, что наклон фотоэлектрических прямых $V = V(\nu)$ с хорошей точностью равен отношению h/e .

3. СТАНОВЛЕНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СВЕТА

Сейчас нам, глубоко воспринявшим идею корпускулярно-волнового дуализма света и материи, трудно себе представить, с каким недоверием встретили современники Эйнштейна гипотезу световых квантов. В этом не было ничего удивительного, так как никто, в том числе и Эйнштейн, не сомневался в том, что явления интерференции и дифракции света можно объяснить только на основе волновой теории, а последняя казалась абсолютно несовместимой с корпускулярными представлениями.

Планк, высоко ценивший Эйнштейна и активно содействовавший его приглашению в Берлин, при представлении кандидатуры Эйнштейна в Прусскую академию писал [17]: «То, что он в своих научных спекуляциях бьет иногда мимо цели, как, например, в

своей гипотезе световых квантов, не следует ему ставить слишком в вину. Так как даже в точных науках необходимо иногда рисковать, чтобы действительно получить нечто новое».

Я хотел бы рассмотреть в этом разделе три работы, которые, с моей точки зрения, существенно укрепили гипотезу световых квантов. Первые две из них принадлежат тоже Эйнштейну (1909, 1916 гг.); одна посвящена вычислению флуктуаций энергии поля черного излучения, вторая — выводу формулы Планка, в котором используются новые представления об испускании и поглощении. Третья, выполненная американским физиком Артуром Комптоном (1922 г.), посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию процесса столкновений отдельных фотонов с электронами.

Эйнштейн доложил первую свою работу на Сольвеевском конгрессе в 1911 г. Затем опубликовал ее в журнале под названием «К современному состоянию проблемы удельной теплоемкости» [18] (рус. пер. [15, т. III, с. 277]).

Путь, намеченный Эйнштейном, — рассмотрение флуктуаций интерферирующих волн поля излучения — довольно сложен; полностью соответствующие выкладки приведены в книге Лорентца [19, с. 15]. Мы ограничимся менее наглядным и поучительным, но простым выводом выражения для флуктуаций энергии.

Будем исходить из термодинамической формулы для средней квадратичной флуктуации энергии $(\overline{\Delta E})^2$ в фиксированном объеме V . Легко показать, что [2, с. 316]

$$(\overline{\Delta E})^2 = kT^2 C_V, \quad (3.1)$$

где $C_V = \partial E / \partial T$ — теплоемкость системы при постоянном объеме V . Так как вывод (3.1) чисто термодинамический, то он применим как к классическим, так и квантовым системам.

Рассмотрим флуктуации равновесной энергии $\bar{E}_\nu d\nu = V \rho_\nu d\nu$ в объеме V и интервале частот $(\nu, \nu + d\nu)$; здесь ρ_ν равно (1.12). Дифференцируя по температуре энергию $\bar{E}_\nu d\nu$ и используя (3.1), находим

$$\begin{aligned} [\Delta(\bar{E}_\nu d\nu)]^2 &= kT^2 (\partial / \partial T) (E_\nu d\nu) = kT^2 V d\nu (\partial \rho_\nu / \partial T) = \\ &= h\nu V d\nu (8\pi / c^3) h\nu^3 e^{h\nu/kT} (e^{h\nu/kT} - 1)^{-2}. \end{aligned}$$

Вычитая и прибавляя единицу к множителю $\exp(h\nu/kT)$ в числителе дроби, получим

$$[\Delta(\bar{E}_\nu d\nu)]^2 = h\nu \bar{E}_\nu d\nu + (c^3 / 8\pi V \nu^2) \bar{E}_\nu^2 d\nu. \quad (3.2)$$

Это выражение чрезвычайно поучительно. Первое слагаемое правой части описывает флуктуацию энергии излучения с корпускулярной, квантовой, точки зрения, второе — с волновой, классической, точки зрения. Таким образом, при изучении флуктуаций энергии черного излучения проявляется корпускулярно-волновой дуализм света.

Вычислим корпускулярную флуктуацию равновесной энергии $\bar{E}_\nu dv$. Так как $\bar{E}_\nu dv = h\nu \bar{N}_\nu dv$, где $\bar{N}_\nu dv$ — равновесное число квантов в объеме V в интервале частот $(\nu, \nu + d\nu)$, то

$$\overline{(\Delta \bar{E}_\nu dv)_{\text{кор}}^2} = (h\nu)^2 \overline{[\Delta (\bar{N}_\nu dv)]^2} = (h\nu)^2 \bar{N}_\nu dv = h\nu \bar{E}_\nu dv.$$

Здесь мы воспользовались тем, что $\overline{[\Delta (\bar{N}_\nu dv)]^2} = \bar{N}_\nu dv$ [2, с. 319]. Мы видим, что квантовая (корпускулярная) флуктуация излучения совпадает с первым слагаемым в (3.2). Для вычисления флуктуаций, обусловленных волновой природой света, мы будем исходить из (3.1), но подставим вместо ρ , классическое значение (1.3); легко видеть, что при этом получается второе слагаемое (3.2). Конечно, при таком расчете менее наглядно, чем у Эйнштейна, проявляется волновая природа второго слагаемого в (3.2).

Существенно отметить, что двучленное выражение (3.2) для флуктуаций энергии, по сути дела, является следствием только формулы Планка (1.12). Сам Эйнштейн хорошо понимал глубокий смысл и фундаментальное противоречие полученных им результатов. В своей статье он пишет: «Я стремился здесь только показать, насколько фундаментальны корни тех трудностей, в которые вовлекает нас формула излучения, даже если мы будем смотреть на нее, как на нечто заданное эмпирически».

В 1916 г. Эйнштейн опубликовал две важные работы, посвященные квантовой теории излучения [15, т. III, с. 386, 393]. Хотя эти работы появились после работы Бора, посвященной квантовой теории атома, мы излагаем их здесь, так как они логически продолжают изложенные выше работы по черному излучению. Эйнштейн пользуется только одним положением квантовой теории атомов Бора: наличием у атомов стационарных безызлучательных состояний.

Работы Эйнштейна содержат чрезвычайно важное понятие об индуцированном излучении атомов, которое явилось принципиальной основой создания лазеров в наше время. Введенные им вероятностные коэффициенты для излучения и поглощения света получили затем интерпретацию в квантовой механике. Эти работы в значительной степени перекрываются, поэтому мы будем излагать их параллельно.

Эйнштейн отмечает, что вывод Планком формулы для черного излучения (1.12) основан на выражении (1.2), связывающем спектральную плотность равновесного излучения ρ , со средней энергией атомного осциллятора $u(\nu, T)$, находящегося в состоянии статистического равновесия с черным излучением при температуре T ; он подчеркивает, что выражение (1.2) выводится на основании законов классической электродинамики и механики, находящихся в полном противоречии с квантовыми представлениями, на которых основан вывод формулы Планка (1.12).

Эйнштейн в первой работе пишет: «Неудивительно, что и сам Планк, и все теоретики, занимающиеся излучением материи, бес-

престанно старались придать своей теории такой вид, чтобы она покоилась на непротиворечивых предпосылках».

Далее, во второй работе Эйнштейн пишет:

«Этот вывод (имеется в виду формула Планка в рассматриваемой работе — А. А.) заслуживает внимания не только благодаря своей простоте, но и в особенности потому, что он вносит некоторую ясность в непонятный нам еще процесс испускания и поглощения излучения веществом.

Положив в основу некоторые гипотезы об испускании и поглощении излучения молекулами, понятные с точки зрения квантовой теории, я показал, что при температурном равновесии молекулы с состояниями, определенными квантовой теорией, находятся в динамическом равновесии с излучением Планка; таким путем формула Планка (1.12) получается удивительно простым и общим способом».

Из теории Бора известно, что внутренняя энергия атома (молекулы) может иметь только ряд дискретных значений $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n, \dots, \epsilon_m, \dots$ ($\epsilon_n < \epsilon_m$). В состоянии статистического равновесия атомов с черным излучением число атомов, находящихся в n -м квантовом состоянии, равно, согласно Больцману,

$$N_n = P_n e^{-\epsilon_n/kT}, \quad (3.3)$$

где T — температура черного излучения, а P_n — постоянный коэффициент, пропорциональный статистическому весу n -го состояния. При равновесии число атомов, переходящих из состояния n в состояние m (в результате поглощения энергии $\epsilon_m - \epsilon_n$ в единицу времени), равно числу атомов, переходящих из состояния m в состояние n (в результате излучения энергии $\epsilon_m - \epsilon_n$ в единицу времени).

Мы сформулируем простые гипотезы, которым будут подчиняться излучение и поглощение.

Так, спонтанное излучение — это переход из более высокого состояния m в более низкое состояние n с излучением энергии $\epsilon_m - \epsilon_n$, который происходит без влияния внешнего поля; он аналогичен излучению вибратора Герца. Весьма естественно представить себе, что число таких переходов в единицу времени пропорционально только числу атомов в состоянии m , т. е. равно $A_m^n N_m$, где A_m^n — коэффициент, зависящий от состояний m и n .

Индукцированное излучение — это переход из состояния m в состояние n с излучением энергии $\epsilon_m - \epsilon_n$, который происходит под действием внешнего поля электромагнитной волны. Он аналогичен уменьшению энергии герцевского вибратора в поле внешней электромагнитной волны, которое имеет место при определенном соотношении фаз колеблющегося вибратора и поля волны в точке вибратора.

Для черного излучения частоты ν число таких переходов в единицу времени равно $B_m^n N_m \rho_\nu$, где ρ_ν — спектральная плот-

ность черного излучения, B_m^n — коэффициент, зависящий от состояний m и n .

Наконец, под действием внешнего поля электромагнитной волны может, аналогично классическому вибратору, происходить поглощение атомами энергии $\epsilon_m - \epsilon_n$ при переходе их из состояния n в состояние m . Число таких переходов в единицу времени равно $B_n^m N_n \rho_\nu$. Очевидно, в равновесии

$$A_m^n N_m + B_m^n N_m \rho_\nu = B_n^m N_n \rho_\nu.$$

Используя (3.3), получим

$$A_m^n P_m e^{-\epsilon_m/kT} + B_m^n P_m e^{-\epsilon_m/kT} \rho_\nu = B_n^m P_n e^{-\epsilon_n/kT} \rho_\nu. \quad (3.4)$$

При неограниченном возрастании T экспоненты стремятся к единице, а ρ_ν неограниченно возрастает, поэтому

$$B_m^n P_m = B_n^m P_n. \quad (3.4a)$$

Используя это соотношение, получим из (3.4)

$$\rho_\nu = \frac{A_m^n / B_m^n}{e^{(\epsilon_m - \epsilon_n)/kT} - 1}. \quad (3.5)$$

Мы видим, что спектральная плотность энергии черного излучения ρ_ν зависит от температуры T так, как это следует из распределения Планка (1.12). Из закона смещения Вина (1.4) вытекает, что

$$A_m^n / B_m^n = \alpha \nu^3, \quad (3.6)$$

$$\epsilon_m - \epsilon_n = h\nu, \quad (3.7)$$

где α и h — универсальные константы. Соотношение (3.7), если отождествлять константу h с постоянной Планка, соответствует правилу частот Бора.

Далее Эйнштейн пишет: «Для того чтобы получить числовое значение постоянной α , нужно иметь точную теорию динамических и механических процессов; здесь мы вынуждены пока что ограничиваться рассмотрением предельного рэлеевского случая высоких температур, для которых справедлива в пределе классическая теория».

Из (1.3), (3.5)—(3.7) получим

$$\alpha = 8 \pi h / c^3. \quad (3.6a)$$

Нетрудно видеть, что тем самым мы завершили вывод формулы Планка для черного излучения.

Работы Эйнштейна произвели глубокое впечатление на современников. Они перебросили мост между теорией черного излучения Планка и квантовой теорией строения атомов Бора.

Во второй работе Эйнштейна имеется еще один результат, который он считает едва ли не более важным. Дело идет об импульсе, передаваемом атому при излучении или поглощении света. Эйнштейн ограничивается вычислением средней кинетической энер-

гии атомов, устанавливающейся в результате актов излучения и поглощения, и доказывает, что на одну степень свободы она равна $kT/2$. Эйнштейн подчеркивает, что этот результат получается только в том случае, если считать, что излучение имеет направленный, «игольчатый» характер, т. е. соответствует представлению о фотонах.

Эйнштейн пишет:

«Однако самым важным, на мой взгляд, является вывод, касающийся импульса, который передается молекуле при спонтанном и индуцированном излучениях. . .

Если пучок воздействует на встретившуюся ему молекулу так, что она посредством элементарного процесса получает или отдает в форме излучения некоторое количество энергии $h\nu$ (индуцированное излучение), то молекула всегда будет получать и импульс $h\nu/c$: при поглощении энергии — в направлении распространения пучка, а при испускании — в противоположном направлении. . .

Если молекула теряет энергию без внешнего возбуждения (спонтанное излучение), то этот процесс тоже является направленным.

Спонтанного излучения в виде сферических волн не существует. В элементарном процессе спонтанного излучения молекула получает импульс отдачи, величина которого равна $h\nu/c$, а направление определяется, согласно современному состоянию теории, лишь «случайностью».

Последняя фраза Эйнштейна весьма характерна для всего его мировоззрения. Он так и не смог примириться с тем, что при последующем развитии квантовой теории направление вылета излученного фотона (т. е. его импульса отдачи) действительно определяется случайностью, без кавычек. Мы не будем приводить здесь вывода Эйнштейна. Полный анализ вопроса предусматривал бы использование соответствующего кинетического уравнения, из которого должно было бы вытекать максвелловское распределение атомов молекул по скоростям.

Выше было отмечено, что опыты Лауэ показали, что рентгеновское излучение представляет собой обычные поперечные электромагнитные волны очень малой длины. Наряду с этим эти опыты доказали, что атомы в кристалле расположены в виде упорядоченной решетки.

Однако изучение рентгеновского излучения в последующие за 1912-м годы привело к ряду противоречий в трактовке этого излучения как электромагнитных волн. Для объяснения этих противоречий была выдвинута гипотеза «большого электрона», согласно которой размеры электрона предполагались порядка длины волны рентгеновского излучения. Однако эта гипотеза плохо объясняла возникшие противоречия.

В 1922 г. американский физик Артур Комптон, изучая рассеяние рентгеновских лучей на элементах малой атомной массы (парафине), обнаружил более мягкое рассеянное излучение. Умень-

шение длины волны этого рассеянного излучения $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ оказалось пропорциональным $1 - \cos \theta$, где θ — угол, образуемый между направлениями рассеянного пучка и первоначального. А. Комптон [20] и независимо П. Дебай [21] показали, что это явление можно трактовать, как столкновение рентгеновского кванта со свободным электроном (в веществах малой атомной массы электроны можно рассматривать как свободные). Вот как сам Комптон в своей статье пишет об этом открытии: «Такое изменение длины волны непосредственно противоречит томсоновской теории рассеяния, поскольку она требует, чтобы рассеивающие электроны, излучающие вследствие вынужденных колебаний, обусловленных первичными рентгеновскими лучами, давали излучение, частота которого в точности равна частоте падающего на них излучения. Никакое усовершенствование теории типа гипотезы о большом электроме не указывает пути избавления от этого затруднения. Поэтому представляется невероятным, чтобы можно было дать удовлетворительное объяснение явлению на основе классической электродинамики».

Ввиду принципиальной важности этой работы мы дадим вывод формулы Комптона для $\Delta\lambda$.

Для того чтобы применить к столкновению рентгеновского кванта с электроном законы сохранения энергии и импульса, покажем, что импульс кванта с энергией $h\nu$ равен $h\nu/c = h/\lambda$, где c — скорость света, а $\lambda = c/\nu$ — длина волны.

Из электродинамики [4, с. 500] известно, что плотность импульса излучения

$$\mathbf{G} = (1/c^2) \mathbf{S}, \quad (3.8)$$

где $\mathbf{S} = (c/4\pi) [\mathbf{E}\mathbf{H}]$ — вектор Умова — Пойнтинга (плотность потока энергии). С корпускулярной (фотонной) точки зрения $\mathbf{G} = n\mathbf{p}$, где n — концентрация фотонов и \mathbf{p} — их импульс; с другой стороны, $\mathbf{S} = nh\nu\mathbf{c}$, поэтому из (3.8) следует, что $\mathbf{p} = h\nu/c$.

Пусть рентгеновский квант энергии $h\nu$ сталкивается со свободным покоящимся электроном и, отдав ему часть своей энергии, рассеивается под углом θ в виде фотона энергии $h\nu'$ ($\nu' < \nu$). На рис. 1 изображен закон сохранения импульса при таком столкновении; здесь m_0 и v — масса покоя и скорость электрона отдачи. Масса движущегося электрона (см. (2.3.8а))*)

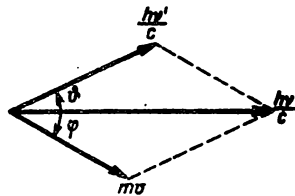


Рис. 1

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

откуда

$$m^2 c^2 (c^2 - v^2) = m_0^2 c^4. \quad (3.9)$$

*) Комптон мог уже пользоваться соотношениями специальной теории относительности, развитой Эйнштейном в 1905 г., которую мы излагаем в гл. II.

Закон сохранения энергии в релятивистской теории дает (2.3.116)

$$h\nu = h\nu' + m_0c^2[(1 - v^2/c^2)^{1/2} - 1], \quad (3.10)$$

где второе слагаемое в правой части — кинетическая энергия электрона после столкновения; перепишем (3.10) в виде

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2. \quad (3.10a)$$

Закон сохранения импульса при столкновении в проекциях на направление начального пучка и ему перпендикулярное имеет вид

$$h\nu/c = (h\nu'/c) \cos \vartheta + mv \cos \varphi, \quad (3.11)$$

$$0 = (h\nu'/c) \sin \vartheta - mv \sin \varphi, \quad (3.11a)$$

где φ — угол между направлениями движения кванта $h\nu$ и скоростью электрона v . Возведя уравнения (3.11) и (3.11a) в квадрат, складывая их и исключая угол φ , получим

$$m^2v^2c^2 = h^2(v^2 + v'^2 - 2vv' \cos \vartheta). \quad (3.12)$$

Возведя в квадрат (3.10a), находим

$$m^2c^4 = h^2(v^2 + v'^2 - 2vv') + 2m_0c^2h(v - v') + m_0^2c^4.$$

Вычитая отсюда (3.12) и используя (3.9), получим

$$0 = h^2 2vv' \cos \vartheta - h^2 2vv' + 2m_0c^2h(v - v'),$$

откуда

$$1 - \cos \vartheta = (m_0c^2/h)(v - v')(vv')^{-1} = (m_0c^2/h)(1/v' - 1/v).$$

Таким образом, уменьшение длины волны рентгеновского кванта при комптон-эффекте равно

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = (c/v' - c/v) = (h/m_0c)(1 - \cos \vartheta) = 2\lambda_0 \sin^2(\vartheta/2), \quad (3.13)$$

где

$$\lambda_0 = h/m_0c = 0,0242 \text{ \AA} \quad (3.13a)$$

— так называемая комптоновская длина волны. Эксперимент полностью подтвердил формулу (3.13). Таким образом, взаимодействие рентгеновского излучения с электроном носит характер столкновения двух частиц.

Вот как сам Комптон [20] пишет об этом:

«Это замечательное согласие между нашими формулами почти не оставляет сомнений в том, что рассеяние рентгеновских лучей есть квантовое явление. . .

В данной теории существенную роль играет предположение о том, что каждый электрон, эффективно участвующий в рассеянии, рассеивает целый квант. В ней используется также гипотеза о том, что кванты излучения приходят в определенных направлениях и в определенных направлениях рассеиваются. Эксперименты, подтверждающие теорию, весьма убедительно показывают, что квант излучения несет не только энергию, но и направленный импульс».

Ф. Хунд в своей книге «История квантовой теории» [22, с. 44] пишет: «И Бор относился к ней (гипотезе световых квантов — А. А.) до 1922 г. сдержанно. Такая позиция неприемлемости или равнодушия физиков изменилась только после открытия комптон-эффекта».

На первый взгляд может показаться удивительным такой консерватизм у такого великого физика, как Бор. По этому поводу мне сказал один мой знаковый физик, что это студенту легко внушить все, что угодно, а у Бора такое количество глубоких сведений и ассоциаций в физике, что ему гораздо труднее отказаться от каких-то устоявшихся точек зрения.

Представляется поразительным, что понадобилось только три года для того, чтобы физики поняли, что свет и электроны проявляют себя в некоторых явлениях, как волны, в то время как в других — как частицы.

4. РАСПРОСТРАНЕНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ НА МОЛЕКУЛЯРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

В 1907 г. Эйнштейн, по-видимому, первый осознал, что гипотеза Планка о дискретных энергетических уровнях атомных осцилляторов имеет более широкое значение, что она в определенных условиях описывает движение (колебание) самих атомов (ионов) кристаллической решетки. Свои соображения Эйнштейн изложил в работе «Теория излучения Планка и теория удельной теплоемкости» [23] (рус. пер. [15, т. III, с. 134]).

Эйнштейн исходил из формулы (1.2), считая, что $u(\nu, T)$ — средняя энергия осциллятора, находящегося в равновесии с черным излучением при температуре T . Он отмечает, что при такой интерпретации под $u(\nu, T)$ можно понимать среднюю энергию «колеблющегося вдоль прямой линии иона». Это и явилось, собственно говоря, той гениальной догадкой, что не только состояния внутриатомного электрона, но и движение самого атома (иона) подчиняется другим, неклассическим законам механики.

В самом деле, если бы ион при всех частотах и температурах двигался по законам классической механики, то в равновесии средняя энергия атомного осциллятора $u(\nu, T) = kT$, что привело бы для черного излучения, испускаемого ионным кристаллом, к закону Рэлея — Джинса (1.3), а не к правильному закону Планка (1.12).

Эйнштейн пишет: «Из всего сказанного выше ясно, в каком смысле надо видоизменить молекулярно-кинетическую теорию теплоты, чтобы привести ее в согласие с законом спектрального излучения черного тела. А именно: до сих пор считали, что движение молекул подчиняется таким же законам, каким подчиняется движение тел нашего повседневного опыта. . . , теперь же приходится сделать предположение, что для колеблющихся с определенной частотой ионов, участвующих в обмене энергией между веществом и излучением, множество состояний, которые могут принимать эти ионы, меньше, чем для тел нашего повседневного опыта. Мы должны при этом предполагать механизм передачи энергии таким, что энергия элементарного образования может принимать только значения $0, h\nu, 2h\nu$ и так далее».

Этой работой Эйнштейн, видимо, заложил основы того, что мы сейчас называем квантовой механикой. В самом деле, до этой

работы считалось, что в атомах имеются осцилляторы, способные поглощать и испускать энергию только порциями $h\nu$. Эйнштейн же высказал предположение, что в определенных условиях движение всех частиц подчиняется новым, не классическим, а квантовым законам.

Эйнштейн вычисляет среднюю энергию $u(\nu, T)$ так, как это делается в статистической физике, если считать возможную энергию осциллятора равной $n h \nu$, где n — целое число; тогда [2, с. 85] средняя энергия атомного осциллятора равна

$$u(\nu, T) = \sum_{n=0}^{\infty} n h \nu e^{-n h \nu / k T} \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n h \nu / k T} \right)^{-1}. \quad (4.1)$$

Второй множитель этого выражения — бесконечно убывающая геометрическая прогрессия со знаменателем $\exp(-h\nu/kT)$, поэтому ее сумма равна $[1 - \exp(-h\nu/kT)]^{-1}$; первый же множитель равен $kT(\partial/\partial T)$ второго. Отсюда сразу следует, что

$$u(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (4.2)$$

согласно (1.18).

Для подтверждения своей гениальной догадки Эйнштейн рассматривает вопрос о теплоемкости твердого тела. Из опыта было известно, что многие твердые тела при обычных температурах имеют молярную теплоемкость, близкую к значению 6 кал/(моль·К) (закон Дюлонга и Пти). Это находило себе простое объяснение в рамках классических представлений. Считая, что моль тела содержит N_A колеблющихся частиц и, следовательно, обладает $3N_A$ степенями свободы, и полагая $u(\nu, T) = kT$, получим для молярной теплоемкости твердого тела

$$C = \frac{\partial}{\partial T} [3N_A u(\nu, T)] = \frac{\partial}{\partial T} (3N_A kT) = 3N_A k = 5,94 \text{ кал/(моль·К)}, \quad (4.3)$$

в согласии с законом Дюлонга и Пти.

Эйнштейн отмечает серьезные трудности, с которыми столкнулась классическая теория теплоемкости твердых тел. Во-первых, существуют элементы — углерод, бор, кремний, имеющие в твердом состоянии при обычной температуре молярную теплоемкость, заметно меньшую $3R = 5,94$ кал/(моль·К). Во-вторых, для сложного вещества, состоящего из молекул, атомы, входящие в соединение, часто не вносят вклада в теплоемкость твердого тела. В-третьих, при понижении температуры теплоемкость твердых тел уменьшается, хотя с классической точки зрения она вообще не должна зависеть от температуры. Эйнштейн показал, что все эти затруднения объясняются (во всяком случае качественно) с единой точки зрения.

Если каждая колебательная степень свободы твердого тела частоты ν обладает с квантовой точки зрения средней энергией;

определяемой выражением (4.2), то ее вклад в теплоемкость равен

$$\frac{\partial}{\partial T} u(\nu, T) = \frac{\partial}{\partial T} \frac{h\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)} = \frac{kh\nu}{kT} \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}. \quad (4.4)$$

Здесь множитель при k , зависящий от $h\nu/kT$, меняется от 1 до 0. Следовательно, соответствующий вклад в теплоемкость в зависимости от отношения $h\nu/kT$ практически может меняться от k до нуля. В первом случае соответствующая степень свободы ведет себя классически, во втором — она в теплоемкости не проявляется. Таким образом Эйнштейн смог качественно объяснить все затруднения классической теории теплоемкости твердого тела.

Далее Эйнштейн рассматривает простое твердое тело (элемент) и делает грубое предположение, что все его атомы колеблются с одной и той же частотой ν . Каждая степень свободы такого тела дает в теплоемкость вклад, определяемый (4.4). Молярная теплоемкость такого тела равна

$$C = 3R \frac{(h\nu/kT)^2 e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}, \quad (4.5)$$

так как $3N_A k = 3R$. Из (4.5) следует, что при высоких температурах, когда $h\nu/kT \ll 1$ и, следовательно, $\exp(h\nu/kT) \approx 1 + h\nu/kT \approx 1$, теплоемкость равна $C = 3R$, т. е. имеет место закон Дюлонга и Пти.

При понижении температуры, когда $h\nu/kT \gg 1$ и, следовательно, $\exp(h\nu/kT) - 1 \approx \exp(h\nu/kT)$, теплоемкость C уменьшается по экспоненциальному закону. На опыте теплоемкость уменьшается медленнее, примерно, как T^3 , что связано с учетом того, что нормальные колебания решетки обладают целым спектром частот ν .

Более точная теория теплоемкости твердого тела была развита П. Дебаем (континуальная модель) и М. Борном и Г. Карманом (решетчатая модель). Однако все они, по сути дела, основываются на выражении (4.4).

Глава II

СПЕЦИАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

При написании настоящей книги я все время ищу компромисс между историческим (хронологическим) и логическим изложением материала.

С логической точки зрения, после обсуждения работы Эйнштейна по квантовой теории теплоемкости (1907 г.) естественно было бы перейти к работе Бора по применению квантовой теории к атому водорода. Однако эта работа появилась только в 1913 г., в то время как в 1905 г. была опубликована знаменитая работа Эйнштейна по специальной теории относительности. Поэтому, хотя специальная теория относительности не использовалась в работе Бора, я предпочитаю изложить вначале специальную теорию относительности. Это оправдано не только с хронологической точки зрения, но и методически, так как ничто так не способствовало пониманию того, что противоречащие «здравому смыслу» понятия и выводы могут оказаться внутренне непротиворечивыми и верными законами природы, как теория относительности.

В связи с этим Л. Д. Ландау заметил, что самой замечательной чертой современной физики является то, что в ней существуют правильные, т. е. соответствующие опыту, утверждения, которые невозможно себе представить (например, относительный характер понятия одновременности, отсутствие траектории у электрона в атоме, кривизна четырехмерного пространства и тому подобное).

1. ЭЛЕКТРОДИНАМИКА В ПЕРИОД, ПРЕДШЕСТВУЮЩИЙ СОЗДАНИЮ СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

В результате исследований Т. Юнга, Ф. Араго и в особенности О. Френеля, выполненных в начале XIX века, окончательно возторжествовала волновая теория света. Действительно, интерференция и дифракция света не могли быть объяснены с корпускулярной точки зрения.

В 60-х годах XIX века Дж. Максвелл показал, что из установленных им уравнений электродинамики следуют решения, описывающие электромагнитные волны, распространяющиеся в пространстве. В 80-х годах Генрих Герц открыл их на опыте. В результате в физике утвердилось волновая электромагнитная теория света.

Физики XIX века не мыслили волн без соответствующей среды, в которой они распространяются. Это привело к идее о мировом

эфире. Поскольку свет распространяется и в пустом пространстве, и в прозрачных телах, предполагалось, что мировой эфир заполняет и огромное пространства Вселенной и промежутки между атомами вещества.

Если скорость света по отношению к неподвижному эфиру равна c , то в соответствии с обычными представлениями кинематики она иная для наблюдателя, движущегося относительно эфира. Если наблюдатель движется сквозь мировой эфир со скоростью v , то скорость света для наблюдателя в направлении, параллельном (антипараллельном) v , равна $c-v$ ($c+v$); аналогично можно учесть эффект при распространении света перпендикулярно скорости v .

Таким образом, в то время как в механике все системы, движущиеся друг относительно друга поступательно и равномерно, равноценны (принцип относительности Галилея), оптические явления, казалось бы, позволяли обнаружить абсолютное движение относительно мирового эфира. Для обнаружения этого явления А. А. Майкельсон и Э. В. Морли в 1887 г. поставили опыт, в котором движение Земли по ее орбите относительно мирового эфира должно бы наблюдаться по смещению интерференционных полос при вращении интерферометра. Я не буду здесь излагать теорию опыта Майкельсона—Морли, отсылая читателя к литературе (см., например, [24, с. 385]), отмечу только, что результаты опыта были отрицательны, т. е. абсолютного движения Земли относительно эфира обнаружить не удалось. Все последующие опыты, выполненные с большей точностью, дали тот же отрицательный результат. Это стало очень серьезным затруднением для представлений, основанных на существовании мирового эфира.

Казалось, что не только уравнения классической механики, но и уравнения электродинамики Максвелла должны быть инвариантны для всех инерциальных систем. Г. А. Лорентц нашел такие преобразования координат и времени (см. раздел 4 этой главы), которые сохранили инвариантными уравнения Максвелла в инерциальных системах (полностью это показал А. Пуанкаре). Преобразования Лорентца приводили к выводу, что твердое тело, движущееся сквозь эфир, сокращает свою длину в направлении движения. Это заключение, которое Лорентц связывал с абсолютной скоростью движения сквозь эфир, несомненно, является предшественником сокращения длин, обусловленного относительным движением масштабов в специальной теории относительности.

Пуанкаре в своем понимании проблемы продвинулся весьма далеко, связывая инвариантность уравнений электродинамики с относительным движением координатных систем. Он также требовал соответствующего изменения законов классической механики. Однако Эйнштейн не только получил независимо выводы Пуанкаре, но и чрезвычайно глубоко проник в сущность теории относительности и указал на ее всеобщую применимость. Ему же принадлежит глубокий анализ понятия времени и относительного характера понятия одновременности.

Я не обсуждаю здесь подробно вопроса о роли Лорентца и Пуанкаре в создании специальной теории относительности, так как придерживаюсь, так же как и большинство физиков, точки зрения, высказанной В. Паули [25, с. 17]: «Основы новой теории были доведены до известного завершения Эйнштейном. Его работа 1905 г. была направлена в печать почти одновременно с сообщением Пуанкаре и написана без осведомленности о работе Лорентца 1904 г. Исследование Эйнштейна содержит не только все существенные результаты обоих названных работ, но также прежде всего изложение совершенно нового и глубокого понимания всей проблемы». Более подробно этот вопрос рассматривается в книге В. Л. Гинзбурга [26].

2. СПЕЦИАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ ЭЙНШТЕЙНА

Как уже было отмечено выше, хотя некоторые важные идеи и математические выражения, связанные со специальной теорией относительности, были высказаны Пуанкаре и Лорентцем, только Эйнштейну удалось до конца понять и сформулировать все ее результаты. В этом отношении основная статья Эйнштейна: «К электродинамике движущихся тел» [27] (рус. пер. [15, т. I, с. 7]), направленная в печать 30 июня 1905 г., представляет собой уникальное явление в науке. В ней дан не только чрезвычайно глубокий анализ основных идей теории относительности, но и применение ее к важнейшим вопросам физики.

Научная плодотворность Эйнштейна в этот период кажется почти невероятной, если учесть, что в том же 1905 г. 18 марта он направляет в печать работу по квантовой теории света, а 11 мая — работу по теории броуновского движения.

В соответствии с той ролью, которую мы приписываем статье Эйнштейна, рассмотрим ее достаточно подробно (мы позволим себе только изменить обозначения, применяемые Эйнштейном, на более современные).

Во введении Эйнштейн пишет:

«... неудавшиеся попытки обнаружить движение Земли относительно «светоносной среды» (т. е. мирового эфира — А. А.) ведут к предположению, что не только в механике, но и в электродинамике нет явлений, соответствующих понятию абсолютного покоя; более того, мы должны предположить, что для всех координатных систем, для которых справедливы уравнения механики (т. е. для всех инерциальных систем — А. А.), справедливы одинаковые электродинамические и оптические законы...

Это предположение, которое мы в дальнейшем будем называть «принципом относительности», мы намерены превратить в предпосылку и, кроме того, сделать допущение, находящееся с первым лишь в кажущемся противоречии, а именно что свет в пустоте всегда распространяется с определенной скоростью c , не зависящей от состояния движения излучающего тела...

Введение «светоносного эфира» окажется при этом излишним, поскольку в предполагаемой теории не вводится «абсолютно покоящееся пространство», наделенное особыми свойствами».

У Эйнштейна нет ссылки на работу Майкельсона и Морли, но имеется указание на неудачу попыток обнаружения движения Земли относительно мирового эфира; поэтому возник вопрос, в какой мере Эйнштейн был знаком с решающим опытом Майкельсона — Морли.

Ответ на этот вопрос дает выдержка из письма Эйнштейна к американскому физическому Р. С. Шэнкленду, приведенная в его статье «Эксперимент Майкельсона — Морли», опубликованной в журнале *Scientific American*, November, 1964. Эйнштейн пишет: «Влияние решающего эксперимента Майкельсона—Морли на мои собственные результаты было весьма косвенным. Я был знаком с ним через важные исследования Г. Л. Лорентца по электродинамике движущихся тел, с которыми я ознакомился до своей работы по теории относительности. Предположение Лорентца о покоящемся эфире показалось мне не убедительным само по себе и по искусственности объяснения результатов опыта Майкельсона—Морли. Что меня более или менее прямо привело к специальному принципу относительности, это было убеждение, что пондеромоторная сила, действующая на движущееся тело в магнитном поле, — не что иное, как электрическое поле. Это, конечно, не логический путь для обоснования теории, а только намек на конструктивный подход, который должен быть контролируем тщательным анализом фактической ситуации».

Статья Эйнштейна состоит из 10 параграфов и двух частей: кинематической и электродинамической. Далее мы последовательно рассмотрим все параграфы, сохраняя их названия.

I. Кинематическая часть

§ 1. Определение одновременности

С замечательной прозорливостью Эйнштейн понял, что для одновременного удовлетворения обоих постулатов, положенных им в основу принципа относительности (инвариантности уравнений электродинамики для инерциальных систем и постоянства скорости света независимо от движения наблюдателя), необходимо подвергнуть критическому анализу понятие одновременности. Такая, на первый взгляд, фантастическая идея могла прийти в голову только гению.

Рассмотрим инерциальную координатную систему K , которую мы для определенности будем называть «неподвижной» (или нештрихованной).

Для того чтобы утверждать, что два события в разных точках A и B произошли одновременно или неодновременно, надо сравнить моменты событий в A и B с часами, расположенными в этих точках. Мы не можем, однако, быть уверенными в том, что двое

часов, помещенных в одной точке и синхронизованные в ней, не рассинхронизируются при переносе каких-либо из них в другую точку. (На самом деле, как мы увидим дальше, именно это и происходит.) Используем для синхронизации часов, расположенных в разных точках системы K , постоянство скорости света, распространяющегося в системе K в любом направлении.

Пусть световой сигнал, испущенный в момент t_A (по A -часам), достиг точки B в момент t_B (по B -часам) и, отраженный из этой точки, возвратился в точку A в момент t'_A . Мы будем считать, что часы в A и B идут синхронно, если

$$t_B - t_A = t'_A - t_B. \quad (2.1)$$

Это и означает, что скорость света

$$c = \overline{AB} / (t_B - t_A) = \overline{AB} / (t'_A - t_B) \quad (2.2)$$

не зависит от того, распространяется ли свет от A к B или в противоположном направлении. С точки зрения мирового эфира это имело бы место только в координатной системе, неподвижной относительно эфира. С точки зрения принципа относительности это имеет место во всех инерциальных системах. Такое понятие синхронности можно распространить на все часы, помещенные во всех точках системы K .

Мы будем говорить, что два события в точках A и B произошли одновременно, если в моменты событий время t_A совпадало со временем t_B .

§ 2. Об относительности длин и промежутков времени

В начале этого параграфа Эйнштейн обсуждает вопрос об измерении длины движущегося стержня. Мне кажется, что этот вопрос лучше рассмотреть после того, как выведены преобразования Лорентца (§ 3), поэтому мы сразу перейдем ко второй части параграфа, в которой Эйнштейн устанавливает относительный характер понятия одновременности.

Рассмотрим кроме системы K , в которой все часы синхронизованы (способом, указанным в предыдущем параграфе), систему K' , прямоугольные оси которой x' , y' , z' параллельны осям x , y , z системы K и которая движется вдоль оси $+x$ со скоростью v относительно системы K (рис. 2). Возьмем твердый стержень ab , жестко связанный с осью x' и, следовательно, движущийся относительно K со скоростью v . Будем следить за временем часов A и B системы K , расположенных напротив концов движущегося стержня ab . Рассмотрим с точки зрения наблюдателей в системах K и K' распространение света вдоль движущегося стержня.

Если луч света вышел из a , отразился в b и возвратился в a , причем соответствующие моменты по часам A и B равны t_A , t_B

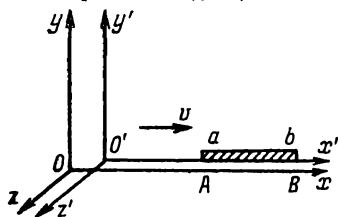


Рис. 2

и t'_A для наблюдателя в системе K (для которого часы в A и B идут синхронно), то

$$t_B - t_A = r/(c - v), \quad t'_A - t'_B = r/(c + v). \quad (2.3)$$

В самом деле, относительная скорость луча и стержня при распространении света от A к B равна $c - v$, а от B к A — равна $c + v$. В дальнейшем мы увидим, что правила сложения скоростей, определенных относительно разных систем K и K' , отличаются от тех, которые имеют место в классической кинематике, но это не относится к сложению скоростей внутри одной системы. В самом деле, в системе K все часы синхронизованы и все масштабы одинаковы, поэтому скорости в ней складываются, как в классической кинематике. Нас не должно смущать, что скорость светового луча относительно стержня (в системе K), равная $c + v$, больше скорости света c , так как скорость $c + v$ не есть скорость сигнала в системе K . Заметим еще, что r в (2.3) — это такая длина стержня ab , какой ее воспринимает наблюдатель в системе K .

С другой стороны, наблюдатель в системе K' , который движется вместе со стержнем и для которого скорость света тоже равна c , как и для наблюдателя в K , желая синхронизовать часы в A и B , использует соотношение (2.1). Время t_B в (2.1) не совпадает с t'_B в (2.3), поэтому для наблюдателя в K' часы A и B идут не синхронно.

Если теперь какие-либо два события, с точки зрения наблюдателя в K , произошли в точках A и B одновременно, т. е. в один и тот же момент времени по синхронизованным часам A и B , то, поскольку часы в A и B с точки зрения наблюдателя в системе K' не синхронизованы, эти события для него произошли не одновременно. Таким образом, понятие одновременности не имеет абсолютного смысла, т. е. то, что одновременно в системе K , уже не одновременно в системе K' .

§ 3. Теория преобразования координат и времени от покоящейся системы к системе, равномерно и прямолинейно движущейся относительно первой

В этом параграфе Эйнштейн выводит преобразования Лоренца. Эйнштейн выводит их не самым простым способом; поскольку результаты не оригинальны, я сошлюсь для их вывода на книгу Беккера [24, с. 266].

Задача заключается в установлении связи между координатами и временем систем K и K' . Эйнштейн пишет:

«Представим себе теперь, что пространство размечено, как в покоящейся системе K посредством покоящегося в ней масштаба, так и в движущейся системе K' посредством движущегося с ней масштаба, и что таким образом получены координаты x, y, z и соответственно x', y', z' ».

Пусть посредством покоящихся часов, находящихся в покоящейся системе, и с помощью световых сигналов указанным в

§ 1 способом определяется время t покоящейся системы для всех точек последней, в которых находятся часы. Пусть, далее, таким же образом определяется время t' движущейся системы для всех точек этой системы, в которых находятся покоящиеся относительно последней часы...

Каждому набору значений x, y, z, t , которые полностью определяют место и время события в покоящейся системе, соответствует набор значений x', y', z', t' , устанавливающий это событие в системе K' ; теперь необходимо найти систему уравнений, связывающих эти величины».

Из [24, с. 269] следует, что

$$x' = \frac{x - vt}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \frac{t - vx/c^2}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}. \quad (2.4)$$

При этом мы предполагаем, что в момент времени $t = t' = 0$ начала координат систем K и K' совпадают.

Решая уравнения (2.4) относительно нештрихованных величин, получим

$$x = \frac{x' + vt'}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}, \quad y = y', \quad z = z', \quad t = \frac{t' + vx'/c^2}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}. \quad (2.4a)$$

Эти выражения получаются из (2.4), если поменять местами штрихованные и нештрихованные величины и заменить v на $-v$. Этот результат полностью согласуется с принципом относительности, из которого следует эквивалентность систем K и K' .

§ 4. Физический смысл полученных уравнений для движущихся твердых тел и движущихся часов

Рассмотрим твердый шар (т. е. тело, которое в состоянии покоя имеет форму шара) в системе K' . Если его центр совпадает с началом координат O' , то его уравнение в системе K' имеет вид

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = R^2, \quad (2.5)$$

где R — радиус покоящегося шара в системе K' . Какова форма этого шара для наблюдателя в системе K ? Мы должны, очевидно, от штрихованных координат перейти к нештрихованным по формулам (2.4).

В момент времени $t = 0$, когда центр шара совпадает с началом координат O в системе K , получим

$$x^2(1 - v^2/c^2)^{-1} + y^2 + z^2 = R^2. \quad (2.6)$$

Мы видим, что в системе K движущийся шар примет форму эллипсоида с полуосями $R(1 - v^2/c^2)^{1/2}$, R , R . Таким образом, длины в направлении движения сокращаются в отношении $1/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$, а длины в направлениях, перпендикулярных к направлению движения, не изменяются.

При $v \rightarrow c$ длины в направлении движения стремятся к нулю, поэтому объемные фигуры превращаются в плоские. Скорости

$v > c$ не могут быть реализованы, так как значение $(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ становится мнимым. Скорость света играет, в некотором отношении, роль бесконечно большой скорости.

Покажем теперь, что для неподвижного наблюдателя в системе K время t' в системе K' течет медленнее, чем его собственное время t . Мы, как всегда, будем считать, что когда начала координат O и O' совпадают, $t = t' = 0$ (это определяет только точку начального отсчета времени). Удобно рассмотреть часы, помещенные в системе K' в начале координат O' ; для них $x = vt$, поэтому из (2.4) следует

$$t' = [t - (v/c^2)x] (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = t (1 - v^2/c^2)^{1/2}. \quad (2.7)$$

Мы видим, что $t' < t$, т. е. часы в системе K' идут медленнее, чем в K . Разлагая корень в ряд и ограничиваясь величинами второго порядка малости по v/c , получим

$$(t - t')/t \approx (1/2) (v/c)^2, \quad (2.7a)$$

т. е. каждую секунду часы в K' отстают на $(1/2) (v/c)^2 c$.

Далее Эйнштейн пишет:

«Отсюда вытекает своеобразное следствие. Если в точках A и B системы K помещены свои собственные синхронно идущие часы, наблюдаемые в покоящейся системе, и если часы из точки A двигать по прямой, соединяющей ее с B , в сторону последней со скоростью v , то по прибытии этих часов в B они уже не будут идти синхронно с часами в A . Часы, передвигавшиеся из A в B , отстают по сравнению с часами, находящимися в B с самого начала, на $(1/2)(v/c)^2 t c$ (c с точностью до величин четвертого и высших порядков), если t — время, в течение которого часы из A двигались в B . Сразу видно, что результат получается и тогда, когда часы движутся из A в B по любой ломаной линии, а также тогда, когда точки A и B совпадают.

Если принять, что результат, доказанный для ломаной линии, верен также для непрерывно меняющей свое направление кривой, то получаем следующую теорему.

Если в точке A находятся двое синхронно идущих часов и мы перемещаем одни из них по замкнутой кривой с постоянной скоростью до тех пор, пока они не вернуться в A (на что потребуются, скажем, t секунд), то эти часы по прибытии в A будут отставать, по сравнению с часами, оставшимися неподвижными, на $(1/2)(v/c)^2 t c$.

Таким образом, уже в своей первой работе по специальной теории относительности Эйнштейн сформулировал то, что получило впоследствии название «парадокс близнецов». Положение, которое обсуждалось затем неоднократно.

§ 5. Теорема сложения скоростей

Рассмотрим вначале частный случай, когда точка в системе K' движется параллельно оси x' со скоростью $u' = dx'/dt'$. Чему равна ее скорость $u = dx/dt$ в системе K , по отношению к которой сис-

тема K' движется со скоростью v ? С точки зрения классической кинематики $u = u' + v$.

Из (2.4а) следует, что скорость равна

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{dx' + v dt'}{dt' + (v/c^2) dx'}$$

Если разделить числитель и знаменатель последнего выражения на dt' , то получим

$$u = \frac{u' + v}{1 + u'v/c^2} \quad (2.8)$$

Мы видим, что формула классической кинематики выполняется только в случае $u'v \ll c^2$, т. е. когда u' и v много меньше скорости света. Если $u' = c$ или $v = c$, то, как легко видеть из (2.8), скорость $u = c$. Таким образом, складывая скорость света с любой скоростью, мы получим опять скорость света. Частным случаем этого является второй постулат специального принципа относительности о постоянстве скорости света во всех инерциальных системах.

Если скорости u' и u не параллельны оси x , а составляют с ней углы ϑ' и ϑ , то можно написать *)

$$u'_x = u' \cos \vartheta', \quad u'_y = u' \sin \vartheta', \quad u'_z = 0, \quad (2.9)$$

$$u_x = u \cos \vartheta, \quad u_y = u \sin \vartheta, \quad u_z = 0. \quad (2.9a)$$

Тогда

$$u_x = u \cos \vartheta = \frac{dx}{dt} = \frac{dx' + v dt'}{dt' + (v/c^2) dx'} = \frac{u'_x + v}{1 + u'_x v/c^2} = \frac{u' \cos \vartheta' + v}{1 + (u'v/c^2) \cos \vartheta'}, \quad (2.10)$$

$$u_y = u \sin \vartheta = \frac{dy}{dt} = \frac{dy' (1 - v^2/c^2)^{1/2}}{dt' + (v/c^2) dx'} = \frac{u'_y (1 - v^2/c^2)^{1/2}}{1 + u'_x v/c^2} = \frac{u' \sin \vartheta' (1 - v^2/c^2)^{1/2}}{1 + (u'v/c^2) \cos \vartheta'}. \quad (2.10a)$$

При этом мы воспользовались выражениями (2.4а). Возведя (2.10) и (2.10а) в квадрат и складывая, а затем деля (2.10а) на (2.10), получим выражения

$$u^2 = \frac{u'^2 + v^2 + 2u'v \cos \vartheta' - (u'^2 v^2/c^2) \sin^2 \vartheta'}{[1 + (u'v/c^2) \cos \vartheta']^2}, \quad \text{tg } \vartheta = \frac{u' \sin \vartheta' [1 - (v/c)^2]^{1/2}}{u' \cos \vartheta' + v} \quad (2.11)$$

Эти выражения определяют модуль и направление скорости u в системе K . Если скорость u' параллельна оси x' , то угол $\vartheta = 0$ и, как видно из (2.11), $\vartheta = 0$; для модуля скорости u мы из (2.11) опять получим (2.8).

Эйнштейн заканчивает этот параграф словами: «Таким образом, мы вывели необходимые нам положения кинематики, построенной в соответствии с нашими двумя принципами, и переходим теперь к тому, чтобы показать их применение в электродинамике».

*) Мы ориентировали ось z' так, чтобы она была перпендикулярна скорости u' (кроме того, из равенства $dz = dz'$ следует, что $u_z = 0$).

II. Электродинамическая часть

§ 6. Преобразование уравнений Максвелла — Герца для пустого пространства. О природе электродвижущих сил, возникающих при движении в магнитном поле

Уравнения Максвелла, справедливые для пустого пространства (вакуума) в неподвижной системе K , имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Здесь \mathbf{E} и \mathbf{H} — напряженности электрического и магнитного полей. Эйнштейн записывает уравнения (2.12) в координатном виде:

$$\begin{aligned} \text{а) } \frac{1}{c} \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, & \text{д) } \frac{1}{c} \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}, \\ \text{б) } \frac{1}{c} \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}, & \text{е) } \frac{1}{c} \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}, \\ \text{в) } \frac{1}{c} \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}, & \text{ж) } \frac{1}{c} \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}, \\ \text{г) } \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} &= 0, & \text{з) } \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Перейдем в этих уравнениях к движущейся со скоростью v координатной системе K' . Из (2.4а) следует, что t и x являются функциями t' и x' , поэтому запишем соотношения

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial t} = \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{v}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{\partial}{\partial x'}, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} = -\frac{v/c^2}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{\partial}{\partial x'}, \quad (2.14а)$$

где использовано (2.4); здесь $\beta = v/c$. Ясно, что

$$\partial/\partial y = \partial/\partial y', \quad \partial/\partial z = \partial/\partial z'. \quad (2.14б)$$

Используя (2.14а) и (2.14б), перейдем в (2.13) к штрихованным координатам и времени. Конечно, при этом мы не получим уравнения вида (2.13). Точнее говоря, под знаками производных по штрихованным переменным будут стоять некоторые комбинации составляющих электрического и магнитного полей в неподвижной системе. Однако, согласно принципу относительности, уравнения Максвелла должны быть инвариантны во всех инерциальных координатных системах, т. е. в K' они должны иметь тот же вид, что и в K . Это означает, что при переходе к движущейся системе K' преобразуются составляющие полей \mathbf{E} и \mathbf{H} . Для того чтобы усмотреть, как преобразуются составляющие полей \mathbf{E} и \mathbf{H}

при переходе к движущейся системе, поступим следующим образом. Учитывая (2.14) и (2.14а), получим из требования инвариантности (2.13б—ж) соотношения (2.15б—е); используя полученные выражения для напряженностей полей и применяя (2.13г, з), находим из инвариантности (2.13а, д) соотношения (2.15а, г). Таким образом, окончательно имеем

$$\begin{aligned}
 \text{а) } E'_x &= E_x, & \text{г) } H'_x &= H_x, \\
 \text{б) } E'_y &= (E_y - \beta H_z)(1 - \beta^2)^{-1/2}, & \text{д) } H'_y &= (H_y + \beta E_z)(1 - \beta^2)^{-1/2}, \\
 \text{в) } E'_z &= (E_z + \beta H_y)(1 - \beta^2)^{-1/2}, & \text{е) } H'_z &= (H_z - \beta E_y)(1 - \beta^2)^{-1/2}.
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

Если решать эту систему уравнений относительно нештрихованных составляющих векторов электрического и магнитного полей, то мы получим выражения, совпадающие с (2.15), в которых штрихованные и нештрихованные составляющие поменялись местами: $E'_x \rightleftharpoons E_x$, $E'_y \rightleftharpoons E_y$, $E'_z \rightleftharpoons E_z$, $H'_x \rightleftharpoons H_x$, $H'_y \rightleftharpoons H_y$, $H'_z \rightleftharpoons H_z$ и v заменено на $-v$ (принцип относительности). Если мы теперь в (2.13), после перехода к штрихованным координатам и времени, заменим посредством (2.15) нештрихованные составляющие полей на штрихованные, то уравнения Максвелла приобретут инвариантный вид (2.13).

Таким образом, уравнения Максвелла (2.13) для вакуума в отсутствие свободных зарядов и токов инвариантны относительно преобразований Лорентца (2.4а) и преобразований составляющих поля (2.15). При преобразованиях Лорентца (2.4) изменяется продольный размер тела (параллельный скорости); при преобразованиях (2.15) изменяются поперечные составляющие полей. Кроме того, при таком преобразовании чисто электрическое (или магнитное) поле превращается в комбинацию электрического и магнитного полей.

Наконец, необходимо отметить следующее. Соотношения (2.15) могут содержать общий множитель, не зависящий от координат и времени, но зависящий, например, от скорости v . Если в правые части равенств (2.15) ввести множитель $\psi(v)$, то, как показал Эйнштейн, надо положить $\psi(v) = 1$. Преобразования полей (2.15) находятся в согласии с теми соотношениями, которые были известны до формулировки специального принципа относительности.

Рассматривая движение электрического заряда в электромагнитном поле, мы можем сформулировать действие последнего на заряд следующими двумя способами:

1. Если в электромагнитном поле движется единичный точечный заряд, то на него, кроме электрического поля, действует со стороны магнитного поля сила Лорентца, равная $(1/c)[vH]$. Вычислим составляющую этой силы по оси y , когда скорость v направлена по оси x ; получим

$$(1/c)[vH]_y = (1/c)(v_z H_x - v_x H_z) = -(v/c)H_z$$

(старая формулировка).

2. Если единичный заряд, связанный с системой K' , движется в электромагнитном поле, то действующая на него в системе K' сила равна напряженности электрического поля в системе K' ; таким образом, из (2.15) и (2.15б) следует, что сила, действующая на единичный заряд со стороны магнитного поля, в нашем случае равна $E_y' = -(1-\beta^2)^{-1/2}(v/c)H_z$. Последнее выражение отличается от силы Лорентца множителем $(1-\beta^2)^{-1/2}$, но совпадает с силой, определенной Эйнштейном (см. второе уравнение в (2.40)). Однако Планк показал, что эйнштейновское определение силы нецелесообразно (см. раздел 3) и что если ввести переменную массу $m(1-\beta^2)^{-1/2}$, то соответствующая сила равна $-(v/c)H_z$, т. е. в точности совпадает с силой Лорентца $(1/c)[vH]$. Можно сказать, что сила Лорентца релятивистски инвариантна.

Аналогичные формулировки связаны с выражениями для преобразования магнитного поля (2.15г—е).

§ 7. Теория аберрации и эффекта Доплера

Пусть очень далеко от начала координат системы K имеется неподвижный монохроматический источник электромагнитных волн. В некоторой области, включающей начало координат системы K , их можно рассматривать как плоские волны, описываемые уравнениями

$$\begin{aligned} E_x &= E_x^0 \sin \Phi, & E_y &= E_y^0 \sin \Phi, & E_z &= E_z^0 \sin \Phi, \\ H_x &= H_x^0 \sin \Phi, & H_y &= H_y^0 \sin \Phi, & H_z &= H_z^0 \sin \Phi. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Здесь E^0 и H^0 — амплитуды электрического и магнитного полей, а фаза равна

$$\Phi = \omega [t - (n_x x + n_y y + n_z z) / c], \quad (2.16a)$$

где ω — циклическая частота, $n = \{n_x, n_y, n_z\}$ — единичный вектор нормали к фронту волны.

Как воспринимается эта волна наблюдателем в движущейся системе K' ?

Применим к (2.16) и (2.16a) преобразования Лорентца (2.4) и преобразования электромагнитного поля (2.15):

$$\begin{aligned} E_x' &= E_x^0 \sin \Phi', & E_y' &= (1-\beta^2)^{-1/2} (E_y^0 - \beta H_z^0) \sin \Phi', \\ E_z' &= (1-\beta^2)^{-1/2} (E_z^0 + \beta H_y^0) \sin \Phi', \\ H_x' &= H_x^0 \sin \Phi', & H_y' &= (1-\beta^2)^{-1/2} (H_y^0 + \beta E_z^0) \sin \Phi', \\ H_z' &= (1-\beta^2)^{-1/2} (H_z^0 - \beta E_y^0) \sin \Phi'; \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\Phi' = \omega' [t' - (n'_x x' + n'_y y' + n'_z z') / c]. \quad (2.17a)$$

Рассмотрим вначале преобразование фазы. Фаза, очевидно, должна быть инвариантом преобразования Лорентца, так как утверждение, что электромагнитное поле в определенной точке четырехмерного пространства — времени равно нулю (т. е. фаза рав-

на нулю или целому кратному 2π), является объективным утверждением, не зависящим от координатной системы; это следует также из линейности преобразований Лорентца. Следовательно,

$$\Phi = \Phi'. \quad (2.18)$$

Подставляя x, y, z, t из (2.4а) в (2.16а) и приравнивая коэффициенты при t', x', y', z' для того, чтобы тождественно выполнялось (2.18), получим

$$\text{а) } \omega' = [\omega(1 - \beta^2)^{-1/2}](1 - n_x \beta), \quad \text{в) } n'_y = n_y(1 - \beta^2)^{1/2}(1 - n_x \beta)^{-1}, \quad (2.19)$$

$$\text{б) } n'_x = (n_x - \beta)(1 - n_x \beta)^{-1}, \quad \text{г) } n'_z = n_z(1 - \beta^2)^{1/2}(1 - n_x \beta)^{-1}.$$

Очевидно, $n_x = \cos \varphi$, если φ — угол между вектором n и направлением оси x (или x'). Из (2.19а) следует, что частота, воспринимаемая наблюдателем, равна

$$\nu' = \nu(1 - \beta \cos \varphi)(1 - \beta^2)^{-1/2}. \quad (2.20)$$

Это и есть релятивистское обобщение принципа Доплера. Из (2.19б) вытекает, что

$$\cos \varphi = n_x = (\cos \varphi' + \beta)(1 + \beta \cos \varphi')^{-1},$$

где $\cos \varphi' = n'_x$, а φ' — угол между лучом света и направлением движения.

Мы видим, что если источник света приближается (удаляется) к наблюдателю, то $n'_x = \cos \varphi' = \mp 1$, но тогда $n_x = \cos \varphi = \mp 1$ и из (2.20) вытекает, что

$$\nu' = \nu(1 \pm \beta)(1 - \beta^2)^{-1/2}. \quad (2.20а)$$

В нерелятивистском приближении ($1 - \beta^2 \approx 1$) имеем

$$\nu' = \nu(1 \pm v/c), \quad (2.20б)$$

т. е. классическую формулу для доплер-эффекта.

Однако теория относительности дает новый важный результат. При $\varphi' = \pi/2$, т. е. при движении источника перпендикулярно лучу зрения, получим $n_x = \beta$ и из (2.20) найдем частоту, равную

$$\nu' = \nu(1 - \beta^2)^{1/2} \approx \nu[1 - (1/2)(v/c)^2]. \quad (2.20в)$$

С классической точки зрения такого эффекта вообще не существует; (2.20в) является прямым следствием релятивистского замедления времени в движущейся системе. Поэтому такое принципиальное значение имело обнаружение этого явления на опыте (Айвз и Стилвелл, 1938 г.).

Из (2.19б) получим

$$\cos \varphi' = (\cos \varphi - \beta)(1 - \beta \cos \varphi)^{-1}. \quad (2.21)$$

Это есть точная релятивистская формула для аберрации света.

Если наблюдать звезду, луч света от которой падал бы на Землю перпендикулярно ее скорости, то $\varphi = \pi/2$ и $\cos \varphi' =$

$=-v/c$. Под углом аберрации понимают угол α между направлением луча и вертикально, так что $\psi' = \pi/2 + \alpha$

$$\sin \alpha = v/c. \quad (2.22)$$

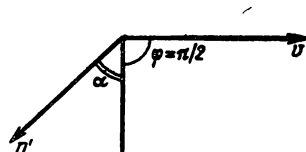


Рис. 3

Это выражение подтверждалось наблюдениями английского астронома Джеймса Бредли в 1728 г.

Выясним теперь, как связаны интенсивности источников света в системах K и K' . Обозначим через A и A' амплитуды электромагнитного поля, измеренные в покоящейся системе K и движущейся системе K' . Найдем связь между A и A' . Проведем плоскость xy через вектор \mathbf{n} , а вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} , перпендикулярный вектору \mathbf{n} , направим в плоскость xy ; в этом случае вектор напряженности магнитного поля \mathbf{H} будет направлен вдоль оси z .

Легко видеть, что

$$E_x = -An_x e^{i\Phi}, \quad E_y = An_x e^{i\Phi}, \quad H_z = Ae^{i\Phi}. \quad (2.23)$$

Из (2.15) получаем

$$\begin{aligned} E'_x &= E_x, & E'_y &= (E_y - \beta H_z)(1 - \beta^2)^{-1/2}, \\ H'_z &= (H_z - \beta E_y)(1 - \beta^2)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Из последних равенств (2.24) и (2.23) вытекает

$$A' e^{i\Phi'} = (A e^{i\Phi} - \beta An_x e^{i\Phi})(1 - \beta^2)^{-1/2}.$$

Так как $\Phi = \Phi'$, а $n_x = \cos \Phi$, то получим

$$A'^2 = A^2 (1 - \beta \cos \Phi)^2 (1 - \beta^2)^{-1}. \quad (2.25)$$

Если угол $\Phi = 0$, то

$$A'^2 = A^2 (1 - \beta)(1 + \beta)^{-1}. \quad (2.25a)$$

Эйнштейн замечает: «Из выведенного уравнения (2.25) следует, что наблюдателю, который будет приближаться ($\Phi = \pi$) со скоростью c к некоторому источнику света, последний будет казаться бесконечно интенсивным».

§ 8. Преобразование энергии лучей света.

Теория давления, производимого светом на идеальное зеркало

Выделим в неподвижной системе K некоторый объем V , содержащий определенный цуг электромагнитных волн. Энергия света в единице объема равна $A^2/8\pi$, где A — амплитуда электромагнитной волны. Очевидно, что энергия рассматриваемого нами цуга волн в объеме V равна

$$\mathcal{E} = (A^2/8\pi)V.$$

Чему равна энергия этого же цуга волн (Эйнштейн называет его определенным световым комплексом) в системе K' ? При переходе от K к K' надо учесть не только изменение амплитуды: $A \rightarrow A'$, но и изменение объема, содержащего этот цуг волн: $V \rightarrow V'$. Некоторая трудность возникает здесь в связи с тем, что объемы V и V' движутся в системах K и K' со скоростью света c ; поэтому для них нельзя ввести соответствующие объемы в состоянии покоя. Эйнштейн преодолевает эту трудность, однако, как нам кажется, не самым простым образом, поэтому мы приведем конечный результат и для вывода сошлемся на [24, с. 310]:

$$V' = V(1 - \beta^2)^{1/2}(1 - \beta \cos \varphi)^{-1}. \quad (2.26)$$

Здесь объем V движется со скоростью c в системах K и K' под углом φ к оси x . Таким образом, из (2.25) и (2.26) следует

$$\{\mathcal{E}'/\mathcal{E} = A'^2 V' / A^2 V = (1 - \beta \cos \varphi)(1 - \beta^2)^{-1/2}. \quad (2.27)$$

Если угол $\varphi = 0$, то отношение энергий в системах K' и K равно

$$\mathcal{E}'/\mathcal{E} = [(1 - \beta)/(1 + \beta)]^{1/2}. \quad (2.27a)$$

Сравнивая (2.27) с (2.20), получим

$$\mathcal{E}'/\mathcal{E} = v'/v. \quad (2.28)$$

По поводу этого важного равенства Эйнштейн пишет: «Замечательно то, что и энергия и частота светового комплекса с изменением состояния движения наблюдателя меняются по одному и тому же закону».

Гипотеза световых квантов была высказана Эйнштейном до опубликования настоящей работы, поэтому он уже понимал, что (2.28) следует из того, что энергия светового комплекса равна $\mathcal{E} = z h \nu$, где z — число квантов и h — постоянная Планка; тогда, в частности, из (2.28) следует, что постоянная Планка h инвариантна при преобразовании Лорентца.

Исследуем теперь отражение плоских волн, рассмотренных в предыдущем параграфе, от идеальной зеркальной поверхности $x' = 0$. Если падающий свет характеризуется в системе K величинами $A_{\text{пад}}$, $v_{\text{пад}}$, $\cos \varphi_{\text{пад}}$, то при наблюдении в системе K' они равны

$$\begin{aligned} A'_{\text{пад}} &= A_{\text{пад}}(1 - \beta \cos \varphi_{\text{пад}})(1 - \beta^2)^{-1/2}, \\ \cos \varphi'_{\text{пад}} &= (\cos \varphi_{\text{пад}} - \beta)(1 - \beta \cos \varphi_{\text{пад}})^{-1}, \\ v'_{\text{пад}} &= v_{\text{пад}}(1 - \beta \cos \varphi_{\text{пад}})(1 - \beta^2)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

как следует из (2.20), (2.21) и (2.25). Отраженная волна в системе K' характеризуется следующими значениями:

$$\begin{aligned} A'_{\text{отр}} &= A'_{\text{пад}}, \\ \cos \varphi'_{\text{отр}} &= -\cos \varphi'_{\text{пад}}, \\ v'_{\text{отр}} &= v'_{\text{пад}}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Наконец, произведя обратное преобразование к неподвижной системе K , получим для отраженного света

$$A_{\text{отр}} = A'_{\text{отр}} \frac{1 + \beta \cos \varphi'_{\text{отр}}}{(1 - \beta^2)^{1/2}} = A_{\text{пад}} \frac{1 - 2\beta \cos \varphi_{\text{пад}} + \beta^2}{1 - \beta^2},$$

$$\cos \varphi_{\text{отр}} = \frac{\cos \varphi'_{\text{отр}} + \beta}{1 + \beta \cos \varphi'_{\text{отр}}} = -\frac{(1 + \beta^2) \cos \varphi_{\text{пад}} - 2\beta}{1 - 2\beta \cos \varphi_{\text{пад}} + \beta^2}, \quad (2.31)$$

$$v_{\text{отр}} = v'_{\text{отр}} \frac{1 + \beta \cos \varphi'_{\text{отр}}}{(1 - \beta^2)^{1/2}} = v_{\text{пад}} \frac{1 - 2\beta \cos \varphi_{\text{пад}} + \beta^2}{1 - \beta^2}.$$

В этих выражениях второй столбец равенств получается, если воспользоваться (2.29), заменив в них β на $-\beta$ (переход от K' к K); третий столбец равенств получается при подстановке во второй соотношений (2.30) и (2.29).

Энергия, падающая на единицу поверхности движущегося зеркала в единицу времени, измеренная в неподвижной системе K , равна

$$(A_{\text{пад}}^2 / 8\pi) (c \cos \varphi_{\text{пад}} - v).$$

Энергия, уходящая с единицы поверхности зеркала в единицу времени, аналогично равна

$$(A_{\text{отр}}^2 / 8\pi) (-c \cos \varphi_{\text{отр}} + v).$$

Разность между этими выражениями, согласно закону сохранения энергии, равна работе, совершенной световым давлением P в единицу времени, т. е. равна величине Pv ; отсюда получим, что световое давление равно

$$P = 2(A_{\text{пад}}^2 / 8\pi) (\cos \varphi_{\text{пад}} - \beta)^2 (1 - \beta^2)^{-1}. \quad (2.32)$$

Если нормально падающий свет «догоняет» зеркало, то $\varphi_{\text{пад}} = 0$ и давление равно

$$P = 2(A_{\text{пад}}^2 / 8\pi) (1 - \beta)(1 + \beta)^{-1}. \quad (2.32a)$$

При $v = c$ ($\beta = 1$) световое давление $P = 0$.

Если нормально падающий свет «встречает» зеркало, движущееся ему навстречу, то $\varphi_{\text{пад}} = \pi$ и давление равно

$$P = 2(A_{\text{пад}}^2 / 8\pi) (1 + \beta)(1 - \beta)^{-1}. \quad (2.32б)$$

При $v = c$ ($\beta = 1$) световое давление $P = \infty$. При $v \ll c$ ($\beta \ll 1$), получим

$$P = 2(A_{\text{пад}}^2 / 8\pi) \cos^2 \varphi_{\text{пад}}, \quad (2.32в)$$

в согласии с классической теорией и опытом.

Эйнштейн заканчивает этот параграф словами: «Примененным здесь методом могут быть решены все задачи оптики движущихся тел. Существо дела заключается в том, что электрическое и маг-

нитное поле в световой волне, подвергающиеся воздействию со стороны движущегося тела, преобразуются к координатной системе, покоящейся относительно этого тела. Благодаря этому каждая задача оптики движущихся тел сводится к задачам оптики покоящихся тел».

§ 9. Преобразование уравнений Максвелла — Герца с учетом конвекционных токов

При наличии плотности заряда ρ и конвекционного тока ρu , где u — скорость заряда в точке x, y, z в момент времени t , уравнения (2.13а—г) приобретают вид

$$\begin{aligned} \text{а) } \frac{1}{c} \left(4\pi\rho u_x + \frac{\partial E_x}{\partial t} \right) &= \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, \\ \text{б) } \frac{1}{c} \left(4\pi\rho u_y + \frac{\partial E_y}{\partial t} \right) &= \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}, \\ \text{в) } \frac{1}{c} \left(4\pi\rho u_z + \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) &= \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}, \\ \text{г) } \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} &= 4\pi\rho. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Уравнения же (2.13д—з) остаются без изменения; отсюда следует, что напряженности электромагнитного поля E и H преобразуются, согласно (2.15). Для того чтобы выяснить, как преобразуется при переходе от системы K к системе K' плотность заряда ρ , выпишем уравнение (2.33г) в системе K' в инвариантном виде:

$$(\partial E'_x / \partial x') + (\partial E'_y / \partial y') + (\partial E'_z / \partial z') = 4\pi\rho'. \quad (2.34)$$

Переходя в (2.34) от системы K' к K , получим*)

$$\begin{aligned} (1 - \beta^2)^{-1/2} [(\nu/c^2) (\partial E_x / \partial t) + (\partial E_x / \partial x) + (\partial E_y / \partial y) - \\ - (\nu/c) (\partial H_z / \partial y) + (\partial E_z / \partial z) + (\nu/c) (\partial H_y / \partial z)] = 4\pi\rho. \end{aligned}$$

Из (2.33г) следует, что сумма второго, третьего и пятого слагаемых равна $4\pi\rho$, а из (2.33а) следует, что сумма первого, четвертого и шестого слагаемых равна $-(\nu/c) 4\pi u_x$, поэтому

$$\rho' = (1 - \beta^2)^{-1/2} (1 - u_x \nu / c^2) \rho; \quad (2.35)$$

конечно, при переходе к движущейся системе K' скорости u_x, u_y, u_z преобразуются по формулам § 5. Если рассматривать плотность заряда, неподвижного в системе K' , то $u_x = \nu$ и

$$\rho' = (1 - \beta^2)^{-1/2} (1 - \beta^2) \rho = \rho (1 - \beta^2)^{1/2}. \quad (2.35а)$$

*) Для перехода от $\partial/\partial x'$ к $\partial/\partial x$ и $\partial/\partial t$ используем (2.14), заменив ν на $-\nu$.

Покажем, что заряд $de = \rho dV$ инвариантен при переходе от неподвижной системы к движущейся; в самом деле,

$$de' = \rho' dV' = \rho(1 - \beta^2)^{1/2} dV(1 - \beta^2)^{-1/2} = \rho dV = de, \quad (2.36)$$

так как $dV' = dV(1 - \beta^2)^{-1/2}$ (из-за сокращения продольного размера движущегося тела, см. § 4).

Таким образом, изменение плотности заряда вызвано только изменением объема, который он занимает.

§ 10. Динамика (слабо ускоренного) электрона

Эйнштейн рассматривает материальную точку массы m с зарядом e (которую он условно называет «электрон»), движущуюся (медленно) в электрическом поле напряженности \mathbf{E} по законам классической механики:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = eE_x, \quad m \frac{d^2y}{dt^2} = eE_y, \quad m \frac{d^2z}{dt^2} = eE_z. \quad (2.37)$$

Эти уравнения не инвариантны относительно преобразования Лорентца. Для того чтобы установить лорентц-инвариантные уравнения механики, Эйнштейн рассуждает следующим образом. Пусть вначале электрон связан с началом координат системы K' , а в течение последующего малого промежутка времени приобретает в системе K' скорость \mathbf{u}' , связанную со скоростью \mathbf{u} соотношениями (2.10) и (2.11); мы будем считать, что $u'_x v/c^2 \ll 1$ и что аналогичное неравенство имеет место для составляющих u'_y и u'_z .

Из принципа относительности, т. е. эквивалентности систем K и K' , следует, что в течение этого малого промежутка времени уравнения движения в системе K' должны иметь тот же вид, что и в системе K , т. е.

$$m \frac{d^2x'}{dt'^2} = eE'_x, \quad m \frac{d^2y'}{dt'^2} = eE'_y, \quad m \frac{d^2z'}{dt'^2} = eE'_z. \quad (2.38)$$

Перейдем теперь обратно от системы K' к системе K . Для получения ускорений воспользуемся выражением (2.10) и продифференцируем его по времени t ; тогда

$$du_x/dt = \dot{u}_x = [1 + u'_x v/c^2]^{-2} (du'_x/dt') (dt'/dt).$$

Здесь $du'_x/dt' = \dot{u}'_x$. Из (2.4) следует, что

$$dt'/dt = (1 - u_x v/c^2) (1 - \beta^2)^{-1/2}.$$

Заменяя здесь u_x по формуле (2.10), получим

$$\dot{u}_x = (1 - \beta^2)^{3/2} \dot{u}'_x, \quad (2.39)$$

где мы пренебрегли $u'_x v/c^2$ по сравнению с единицей и u'_x по сравнению с v . Совершенно аналогично в том же приближении найдем

$$\dot{u}_y = (1 - \beta^2) \dot{u}'_y, \quad \dot{u}_z = (1 - \beta^2) \dot{u}'_z. \quad (2.39a)$$

Воспользовавшись этими соотношениями и (2.15), получим

$$\begin{aligned} \frac{m}{(1-\beta^2)^{3/2}} \frac{d^2x}{dt^2} &= eE'_x = eE_x, \\ \frac{m}{(1-\beta^2)} \frac{d^2y}{dt^2} &= eE'_y = \frac{e}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(E_y - \frac{v}{c} H_z \right), \\ \frac{m}{(1-\beta^2)} \frac{d^2z}{dt^2} &= eE'_z = \frac{e}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(E_z + \frac{v}{c} H_y \right). \end{aligned} \quad (2.40)$$

В правой части (2.40) стоит сила (eE'_x, eE'_y, eE'_z) — ее составляющие), действующая на электрон в координатной системе, связанной с ним. Эйнштейн не очень удачно определяет эту силу как «силу, действующую на электрон», в то время как в левой части стоит ускорение в «неподвижной» системе K . Исходя из обычного соотношения *масса* \times *ускорение* = *сила*, Эйнштейн вводит две массы:

$$\begin{aligned} \text{продольную массу} &= m(1-\beta^2)^{-3/2}, \\ \text{поперечную массу} &= m(1-\beta^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.40a)$$

Далее Эйнштейн пишет: «Конечно, мы будем получать другие значения для масс при другом определении силы и ускорения».

Как мы увидим ниже, при определении силы (2.40), она не равна производной по времени от импульса, а следовательно, для замкнутой системы импульс не остается постоянным. Это приводит к изменению всех основных понятий механики, что вряд ли целесообразно.

3. УРАВНЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МЕХАНИКИ

Рациональная форма уравнений релятивистской механики была в 1906 г. получена Планком на основании электродинамических соотношений. В 1909 г. Г. Н. Льюис и Р. Толмен сформулировали такие же уравнения, используя только принципы механики.

Работа Планка [28] была опубликована в следующем году после выхода в свет фундаментального исследования Эйнштейна. Планк предполагает, что заряженная частица массы покоя m_0 подвергается действию электромагнитного поля. Это, по сути дела, не является ограничением для вывода уравнений механики. Действительно, если силы разного рода (например, электромагнитные и гравитационные) находятся в какой-либо инерциальной системе в равновесии, то они должны быть в равновесии и в другой инерциальной системе, а это значит, что все силы при переходе от одной системы к другой преобразовываются по одному и тому же закону.

Рассмотрим, для простоты, одномерный случай движения. Пусть материальная точка (частица) массы m_0 и с зарядом e движется в системе K' вдоль оси x' со скоростью $u' \ll c$; тогда ее движение в K' определяется классическими уравнениями движе-

ния, а именно

$$m_0 d^2x'/dt'^2 = eE'_x = eE_x. \quad (3.1)$$

Здесь $E'_x = E_x$ — составляющие электрического поля в системах K' и K , удовлетворяющие условию (2.15). Величины x' и t' связаны с x и t преобразованиями Лорентца (2.4), в которых $v = u = dx/dt$.

Из (2.4) и (2.4а) следует

$$\begin{aligned} dx'/dt' &= (dx/dt - v)(1 - v/c^2) dx/dt, \\ d^2x'/dt'^2 &= (d/dt)(dx'/dt') dt/dt' = \\ &= (d^2x/dt^2) \{(1 - v^2/c^2)^{3/2} [1 - (v/c^2)(dx/dt)]^{-3}\}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Так как скорость частицы равна

$$v \approx u \approx dx/dt, \quad du/dt = \underline{d^2x/dt^2}, \quad (3.3)$$

то

$$\begin{aligned} d^2x'/dt'^2 &= (du/dt) [(1 - u^2/c^2)^{3/2} (1 - u^2/c^2)^{-3}] = \\ &= (1 - u^2/c^2)^{-3/2} (du/dt) = (d/dt) [u(1 - u^2/c^2)^{-1/2}]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Таким образом,

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 u}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = X, \quad (3.5)$$

где X — сила в системе K .

Аналогичные рассуждения могут быть распространены и на трехмерный случай [28]; тогда

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 u_x}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = X, \quad \frac{d}{dt} \frac{m_0 u_y}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = Y, \quad \frac{d}{dt} \frac{m_0 u_z}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = Z, \quad (3.6)$$

где $u^2 = u_x^2 + u_y^2 + u_z^2$ — скорость частицы в системе K . Уравнения (3.6) в векторном виде имеют вид

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 \mathbf{u}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (3.7)$$

Здесь $\mathbf{F} \equiv \{X, Y, Z\}$ — сила, действующая на частицу,

$$\mathbf{p} = \frac{m_0 \mathbf{u}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (3.8)$$

— ее импульс (количество движения) и

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (3.8a)$$

— переменная масса частицы, движущейся со скоростью u .

Складывая уравнения движения (3.7) для системы частиц, получим

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i \frac{m_i u_i}{\sqrt{1 - u_i^2/c^2}} \right) = \frac{d}{dt} \sum_i \mathbf{p}_i = \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i \mathbf{F}_i, \quad (3.9)$$

где $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$ — суммарный импульс системы. Для замкнутой сис-

темы $\sum_i F_i = 0$, поэтому

$$P = \sum_i p_i = \text{const}, \quad (3.10)$$

т. е. импульс системы, как и в классической механике, сохраняется. Нетрудно видеть, что уравнения (2.40) не удовлетворяют этому условию.

Положим, как и в классической механике, работу силы за единицу времени равной $A = (F u)$. Вычислим ее, пользуясь для силы выражением (3.7):

$$A = u (d/dt) [m_0 u (1 - u^2/c^2)^{-1/2}] = [m_0 (1 - u^2/c^2)^{-1/2}] u du/dt + \\ + [m_0 u^2 c^{-2} (1 - u^2/c^2)^{-3/2}] u du/dt;$$

так как $u (du/dt) = u (du/dt)$, то

$$A = m_0 u (du/dt) (1 - u^2/c^2)^{-3/2} = (d/dt) [m_0 c^2 (1 - u^2/c^2)^{-1/2}].$$

Считая, как и в классической механике, что работа A равна изменению кинетической энергии T частицы в единицу времени, получим

$$A = dT/dt = (d/dt) [m_0 c^2 (1 - u^2/c^2)^{-1/2}]; \quad (3.11)$$

в результате интегрирования найдем кинетическую энергию частицы

$$T = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} + C, \quad (3.11a)$$

где C — константа интегрирования. Определим ее из условия, что $T = 0$ при $u = 0$, тогда $C = -m_0 c^2$. Окончательно имеем

$$T = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} - 1 \right). \quad (3.11b)$$

В классической области $u^2/c^2 \ll 1$; разлагая корень, получим

$$T = \frac{1}{2} m_0 u^2,$$

т. е. кинетическую энергию в классической механике.

Рассмотрим теперь второй способ установления уравнений релятивистской механики, осуществленный Г. Н. Льюисом и Р. Толменом [29].

Будем считать, что для замкнутой системы и в релятивистской области имеют место законы сохранения массы:

$$\sum_i m_i = \text{const}, \quad (3.12)$$

где сумма берется по всем частицам системы, и импульса:

$$\sum m_i u_x = \text{const}, \quad \sum m_i u_y = \text{const}, \quad \sum m_i u_z = \text{const}, \quad (3.13)$$

где каждая из сумм равна полной составляющей импульса системы по осям x , y и z .

Конечно, и в классической механике имеют место соотношения (3.12) и (3.13), но в релятивистской области они приводят к другим следствиям; это связано с тем, что в теории относительности

масса оказывается зависящей от скорости, причем последняя преобразуется, согласно (3.8а).

Из принципа относительности следует, что (3.12) и (3.13) справедливы во всех инерциальных системах.

Рассмотрим две инерциальные системы K и K' (рис. 2). Исследуем, для простоты, лобовое центральное упругое столкновение двух одинаковых частиц, движущихся в системе K' вдоль оси x' навстречу друг другу со скоростями u' и $-u'$. Очевидно, что в момент столкновения частицы в системе K' остановятся, но будут двигаться в системе K со скоростью v .

Пусть в системе K общая масса частиц в момент столкновения равна M , а массы и скорости частиц до столкновения равны m_1 , m_2 и u_1 , u_2 . Законы сохранения (3.12) и (3.13) в системе K в нашем случае имеют вид

$$m_1 + m_2 = M, \quad (3.14)$$

$$m_1 u_1 + m_2 u_2 = Mv. \quad (3.15)$$

Из формулы сложения скоростей (2.10) следует, что

$$u_1 = (+u' + v) (1 + u'v/c^2)^{-1}, \quad u_2 = (-u' + v) (1 - u'v/c^2)^{-1}. \quad (3.16)$$

Исключая из (3.14) и (3.15) общую массу частиц M и подставляя (3.16), получим, что отношение масс равно

$$m_1/m_2 = (1 + u'v/c^2)(1 - u'v/c^2)^{-1}. \quad (3.17)$$

Запишем правую часть соотношения (3.17) через скорости в системе K . Используя (3.16), имеем

$$1 - u_1^2/c^2 = (1 - u'^2/c^2)(1 - \beta^2)(1 + u'v/c^2)^{-2}.$$

Аналогично,

$$1 - u_2^2/c^2 = (1 - u'^2/c^2)(1 - \beta^2)(1 - u'v/c^2)^{-2}. \quad (3.17а)$$

Таким образом, отношение масс частиц равно

$$m_1/m_2 = (1 - u_2^2/c^2)^{1/2} (1 - u_1^2/c^2)^{-1/2}. \quad (3.18)$$

Отсюда следует, что масса частицы зависит от скорости по закону

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}, \quad (3.19)$$

где m_0 — масса покоя (масса покоящейся частицы). Можно показать, что выражение (3.19) получается, если рассматривать и нецентральное столкновение частиц.

В классической механике сила может быть определена как произведение массы на ускорение или как производная от импульса по времени. В релятивистской механике масса зависит от скорости, поэтому оба эти определения не совпадают. Если мы хотим, чтобы в релятивистской механике принцип равенства действия и противодействия выполнялся одновременно с законом сохранения

импульса для замкнутой системы (см. (3.15)), то сила должна быть определена как производная от импульса. В самом деле, при этом силы взаимодействия, учитываемые попарно, равны нулю, поэтому для замкнутой системы

$$\sum F = 0 = \sum \frac{d}{dt} (mu) = \frac{d}{dt} \sum p,$$

откуда $\sum p = \text{const.}$

Итак, положим, что сила равна

$$F = \frac{d}{dt} (mu) = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 u}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \right), \quad (3.20)$$

или в компонентах

$$F_x = \frac{d}{dt} (mu_x) = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 u_x}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \right) \quad (3.20a)$$

и аналогично для осей y и z . Уравнение (3.20) совпадает с (3.7).

4. ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ МАССЫ И ЭНЕРГИИ

27 сентября того же 1905 г., т. е. менее чем через три месяца после того, как была отправлена в печать фундаментальная статья по теории относительности, Эйнштейн посылает в *Annalen der Physik* [30] (рус. пер. [15, т. I]) небольшую статью, в которой устанавливает знаменитую связь между массой и энергией: $\mathcal{E} = mc^2$. Эта связь играет фундаментальную роль в теории ядерных превращений и лежит в основе современной ядерной энергетики. И Эйнштейн, и другие исследователи еще много раз будут обращаться к выводу и обсуждению соотношения между массой тела и запасом содержащейся в нем энергии, однако нам кажется интересным проследить первоначальный ход идей самого Эйнштейна.

Статья Эйнштейна называется: «Зависит ли инерция тела от содержащейся в нем энергии?» Эйнштейн начинает свою статью фразой: «Результаты ранее опубликованного исследования (имеется в виду статья, изложенная в разделе 2 — А. А.) приводят нас к очень интересному следствию, вывод которого будет дан в этой статье». Отсюда уже видно, что Эйнштейн сразу осознал важность своего открытия.

Автор рассматривает инерциальные системы K и K' (рис. 2) и тело, покоящееся в системе K . Пусть энергия этого тела в системах K и K' равна W и W' . Пусть это тело посылает в направлении, составляющем угол φ с осью x , ограниченный пуч световых волн, обладающий в системе K энергией $\mathcal{E}/2$. Допустим, что одновременно тело испускает в прямо противоположном направлении (т. е. под углом $\pi + \varphi$ с осью x) такой же пуч волн с энергией $\mathcal{E}/2$. Энергии этих пучов волн в системе K' , согласно (2.27), равны

$$\frac{\mathcal{E}}{2} \frac{1 - \beta \cos \varphi}{(1 - \beta^2)^{1/2}}, \quad \frac{\mathcal{E}}{2} \frac{1 - \beta \cos (\pi + \varphi)}{(1 - \beta^2)^{1/2}} = \frac{\mathcal{E}}{2} \frac{1 + \beta \cos \varphi}{(1 - \beta^2)^{1/2}}. \quad (4.1)$$

Если мы через W_1 и W_1' обозначим энергию тела в системах K и K' после испускания света и будем считать справедливым закон сохранения энергии, то

$$W = W_1 + (\mathcal{E}/2 + \mathcal{E}/2) = W_1 + \mathcal{E}, \quad (4.2)$$

$$W' = W_1' + \frac{\mathcal{E}}{2} \frac{1 - \beta \cos \varphi}{(1 - \beta^2)^{1/2}} + \frac{\mathcal{E}}{2} \frac{1 + \beta \cos \varphi}{(1 - \beta^2)^{1/2}} = W_1' + \frac{\mathcal{E}}{(1 - \beta^2)^{1/2}}. \quad (4.2a)$$

Вычитая из второго равенства первое, получим

$$(W' - W) - (W_1' - W_1) = \mathcal{E} [(1 - \beta^2)^{-1/2} - 1]. \quad (4.3)$$

Далее автор пишет:

«В этом соотношении обе разности $W' - W$ и $W_1' - W_1$ имеют простой физический смысл. Величины W' и W (так же как W_1' и W_1) представляют собой значения энергий одного и того же тела, отнесенные к двум координатным системам, движущимся относительно друг друга, причем тело покоится в одной из систем (в системе K).

Таким образом ясно, что разность $W' - W$ (и $W_1' - W_1$) может отличаться от кинетической энергии T (и T_1) тела, взятой относительно другой системы (системы K'), только на некоторую аддитивную постоянную C , которая зависит от выбора произвольных аддитивных постоянных в выражении для энергии W' и W (и W_1' и W_1). Следовательно, мы можем положить

$$W' - W = T + C, \quad W_1' - W_1 = T_1 + C, \quad (4.4)$$

так как постоянная C при испускании света не изменяется».

Вычитая второе равенство в (4.4) из первого и учитывая (4.3), получим

$$T - T_1 = \mathcal{E} [(1 - \beta^2)^{-1/2} - 1]. \quad (4.5)$$

Величины T и T_1 естественно называть кинетическими энергиями тела до и после испускания света. Мы видим, что кинетическая энергия тела T_1 в системе K уменьшается при испускании света на величину, не зависящую от природы тела. Разность $T - T_1$ зависит от скорости тела относительно системы K' так же, как кинетическая энергия частицы (3.116) зависит от ее скорости. Считая $v \ll c$, разлагая в (4.5) корень в ряд по степеням v/c и пренебрегая величинами выше второго порядка, получим

$$T - T_1 = (\mathcal{E}/c^2) v^2/2. \quad (4.6)$$

Эйнштейн заканчивает статью следующими многозначительными словами:

«Из этого уравнения непосредственно следует, что если тело отдает энергию \mathcal{E} в виде излучения, то его масса уменьшается на \mathcal{E}/c^2 . При этом, очевидно, несущественно, что энергия, взятая у тела, прямо переходит в лучистую энергию излучения, так что мы приходим к более общему выводу:

Масса тела есть мера содержащейся в ней энергии; если энергия изменяется на величину \mathcal{E} , то масса меняется соответственно на величину $\mathcal{E}/(9 \cdot 10^{20})$, причем здесь энергия измеряется в эргах, а масса — в граммах. Не исключена возможность того, что теорию удастся проверить для веществ, энергия которых меняется в большей степени (например, для солей радия).

Если теория соответствует фактам, то излучение переносит инерцию между излучающими и поглощающими телами».

К этим замечательным словам нечего прибавить.

5. ФОРМУЛИРОВКА СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ЧЕТЫРЕХМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ. ЧЕТЫРЕХМЕРНЫЙ МИР МИНКОВСКОГО

Представим себе, что в момент $t=t'=0$, т. е. совпадения начал систем координат K и K' , из их общего начала испущена сферическая световая волна. Так как в обеих системах K и K' она должна рассматриваться как сферическая с центром в своем начале координат и так как скорость распространения света c в обеих системах одинаковая, то должно иметь место равенство

$$x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2 t'^2 = 0, \quad (5.1)$$

которое мы в дальнейшем будем называть интервалом. Если вместо времени ввести переменные $u=ict$ и $u'=ict'$, то (5.1) приобретает вид

$$x^2 + y^2 + z^2 + u^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2 + u'^2. \quad (5.1a)$$

В таком виде оно формально (u и u' мнимые величины!) подобно условию постоянства расстояния от некоторой точки пространства до начала координат при повороте координатной системы вокруг начала координат; в самом деле, последнее условие имеет вид

$$x^2 + y^2 + z^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2.$$

Так как из требования (5.1) могут быть выведены преобразования Лорентца, лежащие в основе специальной теории относительности, можно считать, что геометрическая интерпретация (5.1a) так же полностью отвечает положениям специальной теории относительности. Это позволило известному немецкому математику Герману Минковскому в своем знаменитом докладе «Пространство и время»*), положившем начало четырехмерной формулировке принципа относительности, сказать: «М. Г! Воззрения на пространство и время, которые я намерен перед вами развить, возникли на экспериментально-физической основе. В этом их сила. Их тенденция радикальна. Отныне пространство само по себе и

*) Raum und Zeit. Доклад, сделанный 21 сентября 1908 г. на 80-м собрании немецких естествоиспытателей и врачей в Кельне. Phys. Zeit. 1909, Bd 10, S. 1-4 (рус. пер: Лорентц Г. А., Пуанкаре А., Эйнштейн А., Минковский Г. Принцип относительности. Сборник работ классиков релятивизма. — Л.: ОНТИ, 1935, с. 181).

время само по себе должны превратиться в фикции и лишь некоторый вид соединения обоих должен еще сохранить самостоятельность».

Подобное утверждение представляется нам сейчас слишком радикальным. И пространство и время существуют как физические реальности, независимо друг от друга. Однако при преобразованиях координат и времени от одной инерциальной системы к другой преобразования эти носят смешанный характер, т. е. нельзя выделить отдельно преобразования координат. Это, конечно, связано с относительным характером времени, рассмотренным Эйнштейном уже в его первой работе, и, конечно, в этом смысле четырехмерная геометрия ничего не добавляет. Четырехмерное многообразие пространства-времени Минковский назвал миром. Однако с методической точки зрения четырехмерный формализм сыграл огромную роль; кратко мы на этом остановимся ниже. Можно почти с уверенностью сказать, что Эйнштейну не удалось бы создать общую теорию относительности, если бы он не использовал четырехмерного формализма. Сам Эйнштейн в своей основной работе по общей теории относительности пишет [15, т. I, с. 452]: «Обобщение теории относительности существенно облегчилось благодаря работам математика Минковского, который впервые вскрыл формальное равноправие пространственных координат и временной координаты в специальной теории относительности и использовал это равноправие для построения теории».

В случае выделенного движения инерциальных систем K и K' , рассмотренных выше: $y=y'$, $z=z'$, выражение (5.1a) превращается в

$$x^2 + u^2 = x'^2 + u'^2 \quad (5.2)$$

и мы можем рассматривать это преобразование как «поворот» координатной системы (x, u) вокруг ее начала на некоторый угол φ . Мы написали слово «поворот» в кавычках, так как $u=ict$ — мнимая величина. Трактую, однако, (5.2) как реальный поворот на угол φ , получим

$$x' = x \cos \varphi + u \sin \varphi, \quad u' = -x \sin \varphi + u \cos \varphi. \quad (5.3)$$

То обстоятельство, что $u=ict$ — мнимая величина, скажется при определении $\cos \varphi$ и $\sin \varphi$. Во всяком случае, преобразование (5.3) обеспечивает выполнение равенства (5.2). Это связано с тем, что тригонометрические функции имеют не только геометрический смысл, но и являются аналитическими функциями, удовлетворяющими при комплексных значениях аргументов тем же определениям и соотношениям, как и при вещественных значениях аргумента.

Преобразования (5.3) были впервые введены Минковским в докладе Немецкому математическому обществу в Геттингене 5 ноября 1907 г. [31].

Можно было бы определить линейное преобразование (5.3) с неопределенными коэффициентами a_{ik} ; тогда для выполнения

(5.2) эти коэффициенты должны удовлетворять соотношениям, которые автоматически выполняются, если положить их равными $\sin \varphi$ и $\cos \varphi$, так как это сделано в (5.3).

Рассмотрим начало координат системы K' , т. е. точку $x' = 0$; она движется в системе K со скоростью $v = x/t$, поэтому из первого равенства (5.3) следует

$$\sin \varphi / \cos \varphi = \operatorname{tg} \varphi = -x/u = -x/ict = iv/c. \quad (5.4)$$

Мнимое значение для $\operatorname{tg} \varphi$ указывает на то, что мы имеем дело с гиперболическим тангенсом [32, с. 195], так как

$$\operatorname{tg} \varphi = -i \operatorname{th}(i\varphi). \quad (5.5)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{-1/2} = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}, \\ \sin \varphi &= \operatorname{tg} \varphi (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{-1} = (iv/c)(1 - v^2/c^2)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Подставляя эти выражения в (5.3), мы получим преобразования Лорентца (2.4).

Обозначим четырехмерные координаты:

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad ict = x_4. \quad (5.7)$$

Тогда условие (5.1a) имеет вид

$$\sum_i x_i'^2 = \sum_i x_i^2, \quad (5.8)$$

где суммирование здесь и ниже ведется по $i = 1, 2, 3, 4$. Считаем, что в общем виде преобразования Лорентца имеют вид

$$x_i' = \sum_k a_{ik} x_k. \quad (5.9)$$

Покажем, что условие (5.8) налагает определенные требования на коэффициенты a_{ik} ; в то же время мы знаем, что (5.8) выражает аксиому специального принципа относительности. Подставляя (5.9) в (5.8), получим

$$\sum_i x_i'^2 = \sum_i \left(\sum_k a_{ik} x_k \right) \left(\sum_l a_{il} x_l \right) = \sum_{k,l} x_k x_l \sum_i a_{ik} a_{il}.$$

Последняя сумма только тогда превращается в сумму квадратов, когда

$$\sum_i a_{ik} a_{il} = \delta_{kl}. \quad (5.10)$$

Нетрудно получить формулы преобразования, обратного (5.9) умножая обе части (5.9) на a_{il} и суммируя по i , получим

$$\sum_i a_{il} x_i' = \sum_i a_{il} \sum_k a_{ik} x_k = \sum_k x_k \sum_i a_{ik} a_{il} = \sum_k x_k \delta_{kl} = x_l,$$

т. е. (меняя обозначения индексов):

$$x_i = \sum_k a_{ki} x_k'. \quad (5.9a)$$

Отсюда, аналогично (5.10),

$$\sum_i a_{ki} a_{il} = \delta_{kl}. \quad (5.10a)$$

Можно показать, что (5.10a) не налагает новых ограничений на коэффициенты a_{ik} , т. е. (5.10a) выполняется, если выполняется (5.10). Конкретный вид коэффициентов a_{ik} зависит от относительной ориентации инерциальных систем и модуля и направления относительной скорости v . Для частного преобразования Лоренца (2.4), соответствующего движению на рис. 2, матрица (a_{ik}) имеет вид

$$a_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & i\beta \\ \frac{0}{\sqrt{1-\beta^2}} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ i\beta & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

где $\beta = v/c$. На матрице (5.11) могут быть проверены условия (5.10) и (5.10a).

Нетрудно убедиться в том, что определитель (5.11) равен $+1$; вообще и более общему случаю преобразования Лоренца, т. е. более общему случаю «поворота» четырехмерной системы (5.9), соответствует определитель, равный $+1$. Такое преобразование называется ортогональным.

С точки зрения принципа относительности, уравнения физики должны сохранять свою форму при преобразованиях Лоренца, т. е. при повороте четырехмерной координатной системы. Принято говорить, что уравнения физики должны быть ковариантны. Например, уравнения электромагнитного поля Максвелла ковариантны. Нетрудно видеть, что если уравнения физики могут быть записаны в форме соотношения между четырехмерными векторами и тензорами, то они ковариантны.

Рассмотрим вначале простую аналогию в трехмерном пространстве. Очевидно, что уравнения физики должны быть инвариантны относительно поворотов трехмерной координатной системы вокруг начала координат в обычном пространстве, т. е. должны в них одинаково выражаться.

Возьмем классические уравнения механики материальной точки, имеющие вид

$$(m\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{F}, \quad (5.12)$$

или

$$m\omega_i = F_i, \quad i = x, y, z. \quad (5.12a)$$

Здесь m — скалярная масса материальной точки, $\boldsymbol{\omega} = \{\omega_x, \omega_y, \omega_z\}$ — ее ускорение и $\mathbf{F} = \{F_x, F_y, F_z\}$ — приложенная к ней сила.

При повороте координатной системы ускорение ω_i и сила F_i преобразуются одинаково ($\omega_i \rightarrow \omega'_i$, $F_i \rightarrow F'_i$), как составляющие направленного отрезка, т. е. $\boldsymbol{\omega}'$ и \mathbf{F}' остаются параллельными и равными $\boldsymbol{\omega}$ и \mathbf{F} . Это означает, что уравнения (5.12), (5.12a)

остаются без изменений. Таким образом, векторное выражение закона (5.12) обеспечивает его инвариантность относительно поворота координатной системы.

Совершенно аналогично, четырехмерное векторное написание физического уравнения обеспечивает его ковариантность относительно вращений в четырехмерном пространстве, т. е. — инвариантность относительно преобразований Лорентца. В рассмотренном ниже примере мы покажем, как определяются составляющие четырехмерных векторов. Однако до этого мы рассмотрим два важных понятия.

Четырехмерным скаляром, т. е. величиной, не меняющейся при четырехмерном повороте, является интервал (5.1). Очевидно, что бесконечно малый интервал, равный

$$ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 + dx_4^2, \quad (5.13)$$

где $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = ict$, тоже является скаляром.

Введем важное понятие о собственном времени движущегося тела. Это время τ мы определим как время, показываемое часами, связанными с движущимся телом. Так как в течение малого промежутка времени можно считать, что тело движется с постоянной скоростью, то, помещая часы в точку O' , получим ($x' = 0$, $dt' = d\tau$)

$$dt = \frac{dv}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (5.14)$$

где v — скорость тела в некоторый момент времени.

Далее, так как x_i ($i=1, 2, 3, 4$) — составляющие четырехмерного радиус-вектора, а $d\tau$ — скаляр, то величина

$$dx_i/d\tau = u_i, \quad i=1, 2, 3, 4 \quad (5.15)$$

— четырехмерный вектор, который мы назовем четырехмерной скоростью. Из (5.14) и (5.15) следует, что

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{dx}{dt} \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{v_x}{\sqrt{1-\beta^2}}, & u_2 &= \frac{v_y}{\sqrt{1-\beta^2}}, \\ u_3 &= \frac{v_z}{\sqrt{1-\beta^2}}, & u_4 &= \frac{ic}{\sqrt{1-\beta^2}}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Отсюда мы видим, что первые три составляющие четырехмерной скорости с точностью до β^2 совпадают с обычной скоростью.

Минковский постулировал следующие четырехмерные уравнения релятивистской механики точки:

$$m_0 \frac{du_i}{d\tau} = F_i, \quad (5.17)$$

где F_i — четырехмерный вектор силы Минковского. Для того чтобы выяснить его физический смысл, сравним (5.17) с установленными выше уравнениями механики (3.7). Подставляя (5.16) и

(5.14) в (5.17), получим для первых трех уравнений Минковского

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 v_x}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) = F_1 \sqrt{1-\beta^2}, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 v_y}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) = F_2 \sqrt{1-\beta^2},$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 v_z}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) = F_3 \sqrt{1-\beta^2}. \quad (5.18)$$

Так как \mathbf{v} в (5.18) совпадает с \mathbf{u} (3.7), то из сравнения следует, что

$$F_1 = \frac{F_x}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad F_2 = \frac{F_y}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad F_3 = \frac{F_z}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (5.19)$$

где $\mathbf{F} \equiv \{F_x, F_y, F_z\}$ — обычная сила, приложенная к частице. Для того чтобы выяснить физический смысл F_4 , учтем, что $\sum_{i=1}^4 u_i^2 = -c^2$. Умножим теперь обе части (5.17) на u_i и просуммируем по i , тогда

$$m_0 \sum_i u_i \frac{du_i}{d\tau} = \frac{m_0}{2} \frac{d}{d\tau} \sum_i u_i^2 = 0 = \sum_i F_i u_i. \quad (5.20)$$

Учитывая (5.19), получим

$$\frac{(F\mathbf{v})}{\sqrt{1-\beta^2}} + icF_4 = 0. \quad (5.21)$$

Таким образом, четвертое уравнение в (5.17) приобретает вид

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = (F\mathbf{v}). \quad (5.22)$$

Правая часть этого равенства равна работе силы \mathbf{F} в единицу времени. Тогда из закона сохранения энергии следует, что левая часть равна скорости изменения энергии частицы

$$\mathcal{E} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}. \quad (5.23)$$

Разлагая корень по степеням \mathbf{v}/c , получим

$$\mathcal{E} = m_0 c^2 + m_0 v^2/2 + \dots \quad (5.24)$$

Первое слагаемое правой части и есть так называемая энергия покоя частицы; следующее слагаемое определяет кинетическую энергию частицы в классическом приближении.

Мы не будем формулировать уравнения Максвелла в четырехмерной форме, хотя этот способ является наиболее простым для доказательства их ковариантности.

Рассмотрим уравнения для векторного потенциала \mathbf{A} и скалярного потенциала φ [24, с. 292]:

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \rho \mathbf{v}, \quad \nabla^2 \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho, \quad (5.25)$$

где ρ — плотность заряда, а \mathbf{v} — его скорость. Уравнения (5.25)

имеют место, если только

$$\operatorname{div} A + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0. \quad (5.26)$$

Из (5.25) и (5.26) следует уравнение непрерывности:

$$\operatorname{div}(\rho v) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (5.27)$$

Уравнение (5.26) может быть записано в виде

$$\partial A_x / \partial x_1 + \partial A_y / \partial x_2 + \partial A_z / \partial x_3 + \partial (i\Phi) / \partial x_4 = 0, \quad (5.28)$$

т. е. в виде четырехмерной дивергенции от четырехмерного векторного потенциала, имеющего составляющие $\Phi_1 = A_x$, $\Phi_2 = A_y$, $\Phi_3 = A_z$, $\Phi_4 = i\Phi$.

К введению такого четырехмерного потенциала нас побуждают и уравнения (5.25). В самом деле, левые части (5.25) можно рассматривать как применение скалярного оператора

$$\Delta^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_4^2} \equiv \square \quad (5.29)$$

к составляющим четырехмерного векторного потенциала A_x , A_y , A_z , $i\Phi$.

Правые части (5.25) равны $-(4\pi/c)\rho$ и $-(4\pi/c)ic\rho$, что может быть выражено через четырехмерную плотность тока (понятие, имеющееся у Пуанкаре)

$$s_i = \rho_0 u_i = \{\rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, ic\rho\}, \quad (5.30)$$

если воспользоваться (5.16) и (2.35a). Теперь (5.25) можно записать в виде

$$\square \Phi_i = -(4\pi/c) s_i. \quad (5.31)$$

Наконец, уравнение непрерывности мы можем теперь записать в четырехмерной форме:

$$\sum_{i=0}^4 (\partial s_i / \partial x_i) = 0. \quad (5.32)$$

Соотношения (5.28), (5.31) и (5.32) показывают, что все уравнения, связанные с потенциалами, могут быть записаны в четырехмерном виде, что является доказательством их лорентц-инвариантности.

Глава III

ПРОБЛЕМА СУЩЕСТВОВАНИЯ АТОМОВ

Вопрос о существовании атомов и молекул оставался во второй половине XIX века открытым. Наряду со сторонниками атомной гипотезы — Клаузиусом, Максвеллом, Больцманом — существовали ее противники — Оствальд, Мах. Вероятно, самым горячим сторонником атомной гипотезы был Людвиг Больцман.

В предисловии ко второму тому своих «Лекций по кинетической теории газов» (1904 г.) он писал*):

«Тогда, когда печаталась первая часть этой книги (1897 г.), рукопись второй и последней части были уже закончены. . . И как раз в это время нападки на кинетическую теорию стали еще сильнее».

Я убежден в том, что нападки эти основаны на недопонимании и что значение кинетической теории до сих пор просто не осознано».

Аргументы противников кинетической теории теплоты не были лишены разумных оснований. Во всяком случае, необоснованно обвинять их в реакционности и идеализме. Они утверждали, что атомная гипотеза является примитивной тенденцией видеть за всеми физическими явлениями механическую модель. И что, так же как не удалось построить механическую модель эфира, объясняющую законы электромагнитного поля, так же не может удасться попытка механического объяснения законов термодинамики. В последнем противников атомной гипотезы поддержало то, что законы механики обратимы, в то время как второе начало термодинамики необратимо. И хотя сейчас вопрос о существовании атомов каких-либо сомнений не вызывает, — отмеченное выше противоречие остается не вполне выясненным.

Большинство физиков относилось к атомной гипотезе со сдержанной благожелательностью (в этом отношении оценка Больцмана носит, вероятно, слишком пессимистический характер). Эта сдержанность проявилась, например, в том, что в замечательной монографии Дж. У. Гиббса «Основные принципы статистической механики» (1901 г.) очень мало упоминается об атомах и молекулах. Монография эта, являющаяся основой статистической физики атомных и молекулярных систем, написана как статисти-

*) *Больцман Л.* Лекции по теории газов. — М.: Гостехиздат, 1953.

ческая физика механических систем с большим числом степеней свободы.

Однако трудно себе представить, чтобы Г. А. Лорентц, развивавший электронную теорию, и Дж. Дж. Томсон, изучавший прохождение тока через разреженные газы, сомневались в существовании атомов. Несмотря на это, принято считать (и, по-видимому, не без основания), что доказательство существования атомов было получено только после успешных опытов над броуновским движением, количественно подтвердивших его теорию.

1. ТЕОРИЯ БРОУНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ

Первое десятилетие XX века привело не только к таким выдающимся открытиям в физике, как квантовая теория (гл. I) и теория относительности (гл. II). За этот же короткий промежуток времени были доказаны существование атомов и их нуклеарная (ядерная) структура.

Во введении мы уже говорили о тех трудностях, которые возникали на пути признания реального существования атомов. Замечательная возможность экспериментального доказательства существования атомов была предложена Эйнштейном в том же 1905 г., когда им были опубликованы фундаментальные работы по световым квантам и специальной теории относительности, рассмотренные выше. Я имею в виду работу Эйнштейна [33] (рус. пер. [15, т. III, с. 108]) под названием: «О движении взвешенных в покоящейся жидкости частиц, требуемом молекулярно-кинетической теорией теплоты». Независимо от Эйнштейна и почти одновременно с ним польский физик М. Смолуховский развил теорию, аналогичную эйнштейновской.

Мы приведем здесь выдержку из статьи Эйнштейна, так как она чрезвычайно глубоко и ясно характеризует создавшуюся к этому времени ситуацию:

«В этой работе должно быть показано, что, согласно молекулярно-кинетической теории теплоты, взвешенные в жидкости тела микроскопических размеров вследствие молекулярного теплового движения должны совершать движение такой величины, что они легко могут быть обнаружены под микроскопом. Возможно, что рассматриваемые здесь движения тождественны с так называемым «броуновским молекулярным движением»; однако доступные мне данные относительно последнего настолько неточны, что я не мог составить себе об этом определенного мнения.

Если рассматриваемое здесь движение вместе с ожидаемыми закономерностями действительно будет наблюдаться, то классическая термодинамика уже для микроскопически различных областей не может считаться вполне действительной, и тогда возможно точное определение истинных атомных размеров.

Если же, наоборот, предсказание этого движения не выполнится, то это будет веским аргументом против молекулярно-кинетического представления о теплоте».

Мы видим, что Эйнштейн отдавал себе ясный отчет в принципиальном значении развиваемой им теории и вытекающих из нее следствий.

Что собой представляет так называемое «броуновское движение»? Оно было впервые описано в 1827 г. английским ботаником Робертом Брауном. Наблюдая под микроскопом взвешенную в жидкости пыльцу растений, он обнаружил, что отдельные частички пыльцы движутся, непрерывно меняя направление своего движения; при этом даже соседние частички движутся совершенно независимо друг от друга.

Попытки объяснить это движение конвекционными потоками, неравномерным нагреванием со стороны падающего света, взаимодействием частиц друг с другом, температурными разностями и др. оказались безуспешными. В 1877 г. Дельзо впервые высказал мысль, что броуновское движение вызывается неуравновешенностью ударов молекул жидкости о поверхность взвешенной частицы.

Прозорливость же Эйнштейна и Смолуховского сказалась в том, что они связали молекулярно-кинетические характеристики жидкости не с истинным путем, проходимым броуновской частицей (который и не может быть определен на опыте, так как частица меняет свою скорость примерно 10^{18} раз в секунду), а со средним смещением центра массы частицы в заданный промежуток времени.

В § 1 своей работы Эйнштейн рассматривает осмотическое давление, создаваемое взвешенными в жидкости частицами. Если в некоторой части V всего объема жидкости растворено z молей какого-нибудь неэлектролитического вещества и если объем V отделен от остального объема растворителя полупроницаемой перегородкой, сквозь которую свободно проходит растворитель, но не проходит растворенное вещество, то на эту перегородку действует осмотическое давление, равное

$$P = zRT/V, \quad (1.1)$$

где R — газовая постоянная и T — термодинамическая температура. Это так называемый закон Вант-Гоффа, который хорошо оправдывается на опыте, если концентрация растворенного вещества соответствует условию идеального газа. Выражение (1.1) носит исключительно простой характер — оно говорит о том, что растворенное вещество ведет себя в объеме растворителя V , подобно идеальному газу. С молекулярной точки зрения $z = N/N_A$, где N — число растворенных молекул, а N_A — постоянная Авогадро, т. е. число молекул в моле любого вещества.

Поместим теперь в объем V макроскопическое твердое тело произвольной формы. С точки зрения формальной термодинамики оно не вызовет дополнительного давления, подобного осмотическому, так как его наличие просто сводится к созданию дополнительной поверхности, ограничивающей растворитель.

Если теперь мы будем дробить наше макроскопическое тело на все более мелкие частицы, то, достигнув разделения его на отдельные молекулы, мы создадим осмотическое давление (1.1). Очевидно, такое явление начнет проявляться и на более ранней стадии, когда мы раздробим наше твердое тело на микроскопически малые частички. Мы приходим к заключению, что подобного рода взвесь микроскопических частичек (суспензия) вызовет осмотическое давление (1.1), в котором $z = N/N_A$, где N — число взвешенных в объеме V частичек. Таким образом, в случае суспензии осмотическое давление равно

$$P = NRT/N_A V = (RT/N_A)n, \quad (1.2)$$

где $n = N/V$ — число частиц в единице объема, т. е. концентрация суспензии. С молекулярно-кинетической точки зрения формула (1.2) совершенно естественна, так как частички суспензии, подобно молекулам раствора, принимают участие в тепловом движении системы.

В § 2 Эйнштейн на основе более строгих и формальных соображений выводит выражение (1.2); на этом мы останавливаться не будем.

Далее, в § 3 Эйнштейн устанавливает впервые им полученные соотношения между коэффициентом диффузии и подвижностью.

Если под действием силы F частица в вязкой жидкости приобретает постоянную скорость v и если эта скорость не слишком велика, то

$$v = bF, \quad (1.3)$$

где b — подвижность. Как показал Стокс [34, с. 314], для частиц шарообразной формы подвижность равна

$$b = 1/6\pi a\eta, \quad (1.3a)$$

где a — радиус частицы, а η — вязкость жидкости.

Если сила F зависит только от x и действует в направлении эси x , то к бесконечно тонкому слою суспензии δx единичного сечения приложена сила $Fn\delta x$; эта сила уравновешивается осмотическим давлением, равным

$$P(x + \delta x) - P(x) = (\partial P/\partial x)\delta x.$$

В состоянии равновесия получим

$$Fn = \partial P/\partial x = (RT/N_A)(\partial n/\partial x); \quad (1.4)$$

последнее равенство следует из (1.2). Если сила равна $F = \text{const}$, то отсюда получается барометрическая формула (уменьшение концентрации в направлении $-x$).

Если D — коэффициент диффузии частиц, то поток частиц через единицу поверхности в направлении $-x$ в единицу времени равен $-D \, dn/dx$. В состоянии равновесия этот же поток равен «по-

левому» потоку $nv = nbF$. Приравнявая оба потока и используя (1.4), получим

$$D = (RT/N_A)b \quad (1.5)$$

— так называемое соотношение Эйнштейна.

Мы переходим к § 4, центральному параграфу работы Эйнштейна, в котором он выводит выражение для среднего смещения частиц суспензии.

Эйнштейн вводит некоторое малое время τ , удовлетворяющее двум условиям: во-первых, оно настолько мало, что изменение за время τ величин, характеризующих систему, достаточно мало; во-вторых, оно настолько велико, что движения частицы в двух, следующих друг за другом промежутках могут рассматриваться как независимые друг от друга события.

Заранее не ясно, можно ли определить такой промежуток времени. Последующий анализ вопроса Орнштейном, де Гаазом, Лорентцем и Фюртом показал, что обычно для наблюдаемых размеров частиц предположение Эйнштейна обосновано.

Пусть за время τ координата частицы x меняется на λ , которая для разных частиц может быть различна по модулю и знаку. Из общего числа n частиц меняют координату x на величину $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ число частиц

$$dn = n\varphi(\lambda)d\lambda. \quad (1.6)$$

Функция $\varphi(\lambda)$ нам не известна, однако естественно предположить, что она быстро убывает с ростом модуля λ и, в силу случайного характера движения частицы, равна

$$\varphi(\lambda) = \varphi(-\lambda). \quad (1.6a)$$

Кроме того,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\lambda)d\lambda = 1. \quad (1.6b)$$

Пусть $f(x, t)dx$ — число частиц в слое $(x, x + dx)$ в момент времени t ; тогда в момент времени $t + \tau$ их число в этом же слое равно

$$f(x, t + \tau)dx = f(x, t)dx + \tau(\partial f / \partial t)dx, \quad (1.7)$$

так как τ — малый промежуток времени, в течение которого функция $f(x, t)$ изменяется мало. С другой стороны,

$$f(x, t + \tau)dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} f(x + \lambda, t)\varphi(\lambda)d\lambda. \quad (1.7a)$$

В самом деле, интеграл правой части учитывает все переходы частиц из слоя $(x, x + dx)$ во все другие точки за время τ . Под интегралом в (1.7a) существенны только малые λ ($\varphi(\lambda)$ быстро убывает

с ростом $|\lambda|$, поэтому $f(x+\lambda, t)$ можно разложить по степеням λ :

$$f(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\lambda) d\lambda + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \varphi(\lambda) d\lambda + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \varphi(\lambda) d\lambda + \dots$$

Из-за условия (1.6а) все интегралы, содержащие нечетные степени λ , равны нулю. Ограничиваясь квадратичным членом по λ , используя (1.6б) и приравнивая правые части (1.7) и (1.7а), получим

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}, \quad (1.8)$$

где

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \lambda^2 \varphi(\lambda) d\lambda. \quad (1.8a)$$

Уравнение (1.8) есть уравнение диффузии для функции распределения $f(x, t)$ с коэффициентом диффузии D , равным (1.8а).

Пусть в начальный момент времени $t=0$ частицы, полное число которых равно n , сосредоточены вблизи плоскости $x=0$, т. е.

$$f(x, 0) = n\delta(x), \quad (1.9)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция. Если полное число частиц остается постоянным, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x, t) dx = n. \quad (1.10)$$

Можно показать [35, с. 604], что при условиях (1.9) и (1.10) решение уравнения (1.8) имеет вид

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp(-x^2/4Dt), \quad (1.11)$$

т. е. распределение частиц в пространстве носит гауссовый характер. Вычислим «среднее» смещение частиц вдоль оси x к моменту времени t . Так как распределение частиц все время симметрично относительно плоскости $x=0$, то среднее значение $\bar{x}=0$. Поэтому мы определим среднее смещение как $L = \sqrt{\bar{x^2}}$. Имеем

$$\bar{x^2} = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x, t) dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-x^2/4Dt) dx = 2Dt,$$

тогда

$$L = \sqrt{\bar{x^2}} = \sqrt{2Dt}. \quad (1.12)$$

Таким образом, среднее смещение L пропорционально \sqrt{t} . Легко

показать, что в трехмерном случае среднее смещение из начальной точки равно $L\sqrt{3}$.

В § 5, последнем параграфе работы Эйнштейн обсуждает вопрос о том, как можно сравнить с опытом формулу (1.12) и каково значение этого для молекулярно-кинетической теории.

Подставляя в (1.12) вместо D выражение (1.5) и вместо b (1.3а), получим, что среднее смещение равно

$$L = \sqrt{\frac{RT}{N_A} \frac{1}{3\pi a \eta}} \sqrt{t}. \quad (1.13)$$

Эйнштейн оценивает возможность сравнения выражения (1.13) с опытом. Он полагает N_A , согласно результатам кинетической теории газов, равным $6 \cdot 10^{23}$. В качестве жидкости он берет воду при 17°C ($\eta = 1,35 \cdot 10^{-2}$ П), а радиус частицы полагает равным $a = 10^{-4}$ см = 1 мкм. Тогда для времени $t = 1$ мин среднее смещение $L = 6$ мкм, что может быть без особого труда замечено в микроскоп.

Наиболее характерным является здесь пропорциональность среднего смещения L квадратному корню из времени t . Вот как сам Эйнштейн в другой своей статье пишет об этом: [15, т. III, с. 161]: «Из этой формулы мы видим, что средний путь, проходимый частицей*), пропорционален не времени, а корню квадратному из времени. Это происходит оттого, что два пути, проходимые последовательно в две следующие друг за другом единицы времени, не всегда складываются, но также часто вычитаются».

На опыте могут быть проверены и зависимости L от T , a и η . Если в совокупности она соответствует выражению (1.13), то это будет являться веским подтверждением молекулярно-кинетической теории. Кроме того, (1.13) может быть использовано для определения постоянной Авогадро N_A . На сравнении теории с опытом мы остановимся ниже.

Эйнштейн заканчивает свою статью фразой: «Если бы какому-либо исследователю удалось вскоре разрешить поднятые здесь важные для теории теплоты вопросы!»

2. ОПЫТЫ НАД БРОУНОВСКИМ ДВИЖЕНИЕМ

Решающие опыты над броуновским движением были выполнены выдающимся французским физиком Жаном Перреном и его учениками (1908 г.). В 1914 г. он опубликовал книгу, в которой в популярной и увлекательной форме изложил результаты своих исследований [3]. В нашем кратком изложении мы будем довольно близко придерживаться этой книги.

Первая задача, которая стояла перед Перреном, заключалась в изготовлении однородной эмульсии броуновских частиц, т. е. частиц шарообразной формы одинакового радиуса. Перрен изготовлял их из гуммигута или мастики, растирая последние пальцами

*) У Эйнштейна сказано «молекулой», так как он рассматривает осмотический раствор.

в воде или смеси воды со спиртом. После этого он подвергал смесь центрифугированию. Повторное центрифугирование позволило ему получить достаточно однородную эмульсию. Различными остроумными способами Перрен определял радиус шариков эмульсии и их плотность. Для того чтобы читатель мог оценить точность, с которой он работал, приведем результаты измерения тремя различными способами радиуса шариков некоторой партии эмульсии: 0,371 мкм, 0,3667 мкм, 0,3675 мкм.

Если поместить такую эмульсию в жидкость, то в результате броуновского движения частицы будут стремиться распределиться по всему объему жидкости.

Первые опыты Перрен произвел над распределением концентрации эмульсии в поле силы тяжести. Рассматривая частицы эмульсии как «гигантские молекулы», можно было думать, что они будут вести себя в жидкости подобно молекулам растворенного вещества. Согласно исследованиям Рауля и Вант-Гоффа, растворенное вещество при малых концентрациях ведет себя подобно идеальному газу. Поэтому если эмульсию поместить в поле силы тяжести, то, с молекулярно-кинетической точки зрения, в равновесии должна установиться «эмульсионная атмосфера», концентрация в которой должна меняться по барометрическому закону:

$$n(h) = n_0 \exp(-m_0 gh/kT). \quad (1.14)$$

Здесь $n(h)$ — концентрация эмульсии на высоте h , n_0 — концентрация эмульсии на высоте $h=0$, $k=R/N_A$ — постоянная Больцмана, R — газовая постоянная и N_A — постоянная Авогадро. Наконец, эффективная масса частицы эмульсии равна

$$m_{эф} = (4/3)\pi a^3 (\rho_э - \rho_ж), \quad (1.14a)$$

где a — радиус частицы эмульсии, $\rho_э$ и $\rho_ж$ — плотности шарика эмульсии и жидкости.

Измеряя под микроскопом $n(h)$ и n_0 , получим постоянную Авогадро, равную

$$N_A = \frac{RT \lg [n_0/n(h)]}{(4/3)\pi a^3 (\rho_э - \rho_ж) gh}. \quad (1.14б)$$

Для характеристики масштаба измерений заметим, что с частицами (зернышками) радиуса 0,212 мкм концентрация $n(h)$ падала примерно вдвое при увеличении высоты до $h=30$ мкм.

Были произведены опыты, в которых менялись: объемы зернышек (в отношении 1 : 50), вещество зернышек (гуммигут, мастика) жидкости взвеси (вода, глицерин с 12 % воды), температура (переохлажденная вода -9°C , вода при $+60^\circ\text{C}$); в общем, вязкость жидкости менялась в отношении 1 : 250.

Несмотря на такие изменения условий опыта (в том числе высоты h), постоянная Авогадро колебалась в пределах от $6,5 \cdot 10^{23}$ до $7,2 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$. Относительное постоянство N_A и ее близкое совпадение с тем, что давали кинетическая теория газов, электролиз и черное излучение, убедительно свидетельствовали в пользу молекулярно-кинетической теории теплоты.

Перрен пишет: «Становится весьма трудным отрицать объективную реальность молекул».

Механизм движения отдельной броуновской частицы, исследованный Эйнштейном, дает новую возможность определения постоянной Авогадро и, следовательно, может служить другим критерием справедливости молекулярно-кинетической теории теплоты.

Определяя из опыта среднее значение квадрата проекции смещения броуновской частицы, можно из (1.13) найти постоянную Авогадро N_A . Широко варьируя условия опыта, Перрен получил для постоянной Авогадро наиболее вероятное значение: $N_A = 6,4 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹, что соответствует нижней границе значений, полученных из измерений над равновесной «эмульсионной атмосферой». (Заметим, что сейчас для постоянной Авогадро принимают значение $N_A = 6,022045 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹.)

Свою замечательную книгу, чтение которой интересно не только с познавательной точки зрения, но доставляет и эстетическое удовольствие, Перрен заканчивает краткими выводами. Он сопоставляет 16 способов измерения постоянной Авогадро N_A ; среди них — внутреннее трение в газах, распределение зерен эмульсии по высоте, броуновские смещения, голубой цвет неба, спектр черного излучения, заряд электрона, радиоактивные явления и др.

Постоянная N_A , получаемая из всех этих явлений, изменяется от $6,0 \cdot 10^{23}$ до $7,5 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹.

Перрен пишет:

«Нельзя не удивляться, видя, как согласуются между собой результаты исследования столь различных явлений».

Если мы вспомним, что одна и та же величина получается в результате варьирования условий и явлений, к которым прилагаются эти методы, — мы придем к заключению, что реальность молекулы имеет вероятность, весьма близкую к достоверности».

НУКЛЕАРНАЯ (ЯДЕРНАЯ) СТРУКТУРА АТОМА

Хотя подлинное доказательство существования атомов пришло только в результате экспериментальных исследований Перрена по броуновскому движению, уже в конце XIX века возникли различные модели внутреннего строения атома.

После открытия Дж. Дж. Томсоном электрона и приближенно определения его заряда и массы, возникло естественное предположение, что электрон входит в состав атомов. Так как атомы в целом нейтральны, то было необходимо предположить, что они содержат и положительный заряд, равный по модулю сумме зарядов, входящих в атом электронов.

В отношении распределения положительного заряда в атоме существовало два типа моделей: нуклеарная (ядерная) и с положительным зарядом, непрерывно распределенным по всему объему атома. К числу моделей первого типа относилась «нуклеопланетарная структура» Ж. Перрена (1901 г.) и «сатурнообразная система» Х. Нагаоки* (1904 г.). Важной (и правильной) особенностью этих моделей являлось то, что положительный заряд атома, связанный с его основной массой, был сосредоточен в центре атома в малом ядре, а электроны двигались вокруг него. Эти модели, являвшиеся продуктом только воображения, обладали, с точки зрения классической электродинамики, одним существенным недостатком — они были неустойчивы. В самом деле, электроны, движущиеся с ускорением, должны излучать электромагнитную энергию, и атом через короткий промежуток времени должен был бы разрушиться (см. гл. V, раздел 1).

Этим недостатком не обладала модель атома, предложенная Дж. Дж. Томсоном, в которой предполагалось, что положительный заряд Ze , связанный с основной массой атома, равномерно распределен по объему шарика радиуса $a \approx 10^{-8}$ см, а Z электронов расположены в различных устойчивых конфигурациях внутри атома. Например, 4 электрона должны были быть помещены в вершинах правильного тетраэдра. Томсон не нашел общего решения для Z электронов, поэтому он и рассмотрел модель, в которой электроны равномерно распределены по кольцам, вращающимся внутри атома. Линейчатые спектры атомов возникали, согласно Томсону, в результате колебаний электронов около положения устойчивого равновесия. Томсон достиг некоторого, весьма ограниченного, успеха в объяснении химических свойств элементов, но не смог объяснить линейчатых спектров атомов.

Экспериментальные исследования, выполненные в начале XX века, «высказались» в пользу нуклеарной модели атома. П. Леонард, исследуя поглощение β -лучей, пришел к заключению (1903 г.), что положительный заряд не может быть распределен непрерывно по объему атома, что последний в основном пуст.

В Манчестере, в лаборатории Эрнеста Резерфорда, по предложению последнего Г. Гейгер и Э. Марсден исследовали рассеяние α -частиц в разных веществах. Они нашли (1909 г.), что небольшая часть падающих α -частиц отклоняется на большие углы (порядка 150°). Такое поведение α -частиц нельзя было понять на основе модели атома Дж. Дж. Томсона, поэтому Резерфорд обратился к нуклеарной модели атома, но предположил, что положительный заряд, связанный почти со всей массой атома, сосредоточен в его центре в очень малом по сравнению со всем атомом объеме.

1. РАССЕЯНИЕ АЛЬФА-ЧАСТИЦ ЯДРАМИ ТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Обсудим работу Резерфорда [36] (рус. пер. [37, с. 207]), в которой он вывел свою знаменитую формулу для рассеяния α -частиц ядрами атомов тяжелых элементов и впервые ввел в физику важное понятие о дифференциальном сечении рассеяния.

Эрнест Резерфорд родился 30 августа 1871 г. в Спринг-Броуэ (сейчас Брайтуотер) в Новой Зеландии. В 1894 г. он окончил Кентерберийский колледж Новозеландского университета в Крайстчерче. В 1895—98 гг. Резерфорд работал в Кавендишской лаборатории в Кембридже у профессора Дж. Дж. Томсона; в 1898—1907 гг. он — профессор университета Мак-Гилла в Монреале (Канада). В 1907 г. Резерфорд вернулся в Англию и стал профессором и директором физической лаборатории Манчестерского университета. С 1919 г. и до самой смерти в 1937 г. он — профессор Кембриджского университета и директор Кавендишской лаборатории.

Во введении мы уже отмечаем заслуги Резерфорда в изучении радиоактивности. Вторая фундаментальная область его исследований — это атомное ядро и планетарная модель атома; последняя излагается ниже.

За исследования по превращению элементов и химии радиоактивных веществ Резерфорду в 1908 г. была присуждена Нобелевская премия по химии.

Вся его деятельность является образцом упорной работы в избранном направлении. Резерфорд был замечательным экспериментатором с глубокой физической интуицией.

Резерфорд создал большую школу физиков, среди которых такие значительные имена, как Г. Гейгер, О. Ган, Г. Мозли, Дж. Чэдвик, Н. Бор, П. Блэккет, П. Л. Капица, Дж. Кокрофт и др.

Резерфорд был членом почти всех научных академий мира, в том числе с 1925 г. — иностранным членом АН СССР.

Более подробные сведения о научной биографии Резерфорда можно найти в содержательной книге Д. С. Данина *).

*) Данин Д. С. Резерфорд. — М.: Молодая гвардия, 1968.

Рассмотрим ядерную модель атома. Положительный заряд Ze (e — элементарный заряд) атома сосредоточен в центре в малом объеме так, что его взаимодействие с α -частицей определяется силой отталкивания, равной Zee'/r^2 , где e' — заряд α -частицы, r — ее расстояние до ядра. Будем считать, что Z электронов нейтрального атома равномерно распределены внутри сферы радиуса R , центр которой совпадает с ядром. Если α -частица находится от ядра на расстоянии $r < R$, то сила притяжения ее электронами, направленная к центру атома, равна $Zee'r/R^3$ (действует только заряд электронов внутри сферы радиуса r).

Таким образом, результирующая сила, действующая на α -частицу, будет равна

$$F = Zee' (1/r^2 - r/R^3). \quad (1.1)$$

Работа этой силы при сближении α -частицы от расстояния R до r равна

$$- \int_R^r F dr = Zee' \int_R^r \left(-\frac{1}{r^2} + \frac{r}{R^3} \right) dr = Zee' \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3} \right). \quad (1.2)$$

При центральном, лобовом столкновении α -частицы с ядром атома она под действием силы F остановится на расстоянии b от ядра. Если масса α -частицы равна m , а начальная скорость v , то, согласно (1.2), b определяется из уравнения

$$mv^2/2 = Zee' (1/b - 3/2R + b^2/2R^3). \quad (1.3)$$

Считая, что $b \ll R$ и отбрасывая два последних слагаемых в правой части (1.3), т. е. пренебрегая действием на α -частицу электронов, получим

$$b = 2Zee'/mv^2. \quad (1.4)$$

Эта величина будет играть существенную роль в дальнейшем.

Резерфорд для оценки расстояния b положил для ядра золота $Z=100$, $e'=2e$ и скорость $v=2,09 \times 10^9$ см/с; при этом получается $b = 3,4 \cdot 10^{-12}$ см, что, действительно, много меньше $R \approx 10^{-8}$ см. Для всех отклонений α -частицы, больших 1° , можно пренебречь действием электронов атома. Под действием кулоновского отталкивания ядра α -частица движется по гиперболе, в фокусе K которой находится ядро (рис. 4).

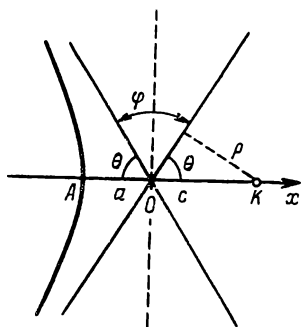


Рис. 4

Обозначим: $a = \overline{OA}$ — расстояние от центра O до вершины гиперболы A , $c = \overline{OK}$ — расстояние от центра O до фокуса K , $s = a + c$ — расстояние от вершины гиперболы до фокуса (эксцентриситет гиперболы $\varepsilon = c/a > 1$), ρ — расстояние от ядра (фо-

куса) до асимптоты, по которой α -частица двигалась бы при отсутствии отталкивания (прицельный параметр); v_0 — скорость α -частицы в вершине A , когда она ближе всего к ядру.

Если v — скорость α -частицы вдали от ядра, то из законов сохранения энергии и момента импульса следует

$$mv^2/2 = mv_0^2/2 + Zee'/s, \quad (1.5)$$

$$pv = sv_0. \quad (1.6)$$

Подставляя в (1.5) Zee' из (1.4), получим

$$v_0^2 = v^2(1 - b/s). \quad (1.7)$$

Эксцентриситет равен *)

$$\varepsilon = c/a = 1/\cos \theta, \quad (1.8)$$

где θ — угол, образуемый асимптотой и осью x . Далее, расстояние от вершины гиперболы до фокуса равно

$$s = c + a = c(1 + \cos \theta) = (p/\sin \theta)(1 + \cos \theta) = p \operatorname{ctg}(\theta/2), \quad (1.9)$$

где мы воспользовались (1.8), рис. 4 и выражением для котангенса половинного угла.

Умножим обе части (1.7) на s^2 и определим из него b :

$$b = s[1 - (v_0/v)^2].$$

Используя (1.6) и (1.9), получим, заменяя s и $(v_0/v)^2$,

$$b = 2p \operatorname{ctg} \theta;$$

так как угол рассеяния равен (рис. 4)

$$\varphi = \pi - 2\theta,$$

то окончательно находим

$$b = 2p \operatorname{tg}(\varphi/2), \quad (1.10)$$

или

$$\operatorname{ctg}(\varphi/2) = 2p/b,$$

где расстояние b можно рассчитать из (1.4). Выражение (1.11) — это очень важное соотношение, связывающее прицельный параметр p с углом рассеяния φ .

Резерфорд составил небольшую табличку, из которой видно, как с уменьшением отношения p/b растет угол рассеяния φ :

p/b	10	5	2	1	0,5	0,25	0,125
φ°	5,7	11,4	28	53	90	127	152

*) Равенство (1.8) проще всего получить, если воспользоваться уравнением гиперболы в полярных координатах: $r = p/1 - \varepsilon \cos \Phi$, где r — радиус-вектор, Φ — полярный угол, p — расстояние от ядра до асимптоты, ε — эксцентриситет. Устремим $r \rightarrow \infty$, тогда $\Phi \rightarrow \theta$; мы видим, что при этом $1 - \varepsilon \cos \theta = 0$.

В этой же работе Резерфорд рассматривает статистическую теорию рассеяния α -частиц; при этом он вводит фундаментальное понятие о дифференциальном сечении рассеяния.

Вероятность α -частице пройти от ядра тяжелого атома на расстоянии между p и $p+dp$ (если рассеяние происходит в тонком слое толщины t при концентрации атомов в слое, равной n), равна

$$d\omega = 2\pi p dp nt.$$

Вероятность отнесена к одной частице, падающей на единицу поверхности. Кроме того, считается, что может иметь место только однократное рассеяние, что справедливо при $p \ll 10^{-11}$ см и $t \ll 10^{-3}$ см.

Находя $p dp$ из (1.11), получим

$$d\omega = (\pi/4) ntb^2 \cos(\varphi/2) \sin^{-3}(\varphi/2) d\varphi, \quad (1.12)$$

где последнее выражение определяет вероятность α -частице отклониться от первоначального направления на угол, лежащий между φ и $\varphi+d\varphi$. Если Q — поток частиц, то $Q d\omega$ частиц рассеются в единицу времени на угол $(\varphi, \varphi+d\varphi)$. Найдем число частиц, попадающих в единицу времени на единицу поверхности экрана под углом φ на расстоянии r от мишени. Площадь шарового пояса на сфере радиуса r под углом $(\varphi, \varphi+d\varphi)$ равна $2\pi r \sin \varphi r d\varphi = 2\pi r^2 \sin \varphi d\varphi$; поэтому из $Q d\omega$ рассеянных частиц на единицу площади попадает их число, равное

$$\begin{aligned} &= Q d\omega / 2\pi r^2 \sin \varphi d\varphi = Qntb^2 / 16r^2 \sin^4(\varphi/2) = \\ &= Qe'^2 ntZ^2 e^2 / 4r^2 m^2 v^4 \sin^4(\varphi/2), \quad (1.13) \end{aligned}$$

где мы заменили b^2 выражением (1.4).

Из последней формулы следует, что число рассеянных в секунду под углом φ (на единице поверхности экрана) α -частиц пропорционально:

- 1) $\sin^{-4}(\varphi/2) = \text{cosec}^4(\varphi/2)$ или φ^{-4} , если φ мало;
- 2) числу атомов n в единице объема рассеивающего вещества;
- 3) толщине рассеивающей пленки t , если ее толщина мала;
- 4) квадрату заряда ядра Ze ;
- 5) v^{-4} , где v — начальная скорость α -частицы.

Количественная проверка этих соотношений была выполнена в работе Х. Гейгера и Э. Марсдена [38]. Общий метод, примененный ими, заключался в подсчете числа α -частиц, рассеянных в разных условиях под различными углами. Число рассеянных α -частиц определялось по методу сцинтилляций (вспышкам на экране сернистого цинка при попадании в него α -частицы).

Вот что пишет по поводу этой работы сам Резерфорд [39] (рус. пер. [37, с. 238]):

«Это была весьма трудная и кропотливая работа, так как нужно было сосчитать много тысяч частиц. Результаты Гейгера и Марсдена весьма близко согласуются с теорией. При очень малой

толщине рассеивающей пленки рассеяние оказалось прямо пропорционально этой толщине; оно оказалось обратно пропорциональным четвертой степени скорости падающих α -частиц. Специальным изучению подверглось число частиц, рассеянных на углы от 5 до 150°. Хотя в этом промежутке число рассеянных частиц уменьшается в отношении 200 000 : 1, связь между этим числом и углом согласовывалась с теорией в пределах ошибок опыта. Гейгер и Марсден нашли, что рассеяние различными атомами вещества приблизительно пропорционально квадрату атомной массы, откуда следует, что заряд ядра приблизительно пропорционален атомной массе. Определяя число α -частиц, рассеянных тонкими пленками золота, они заключили, что нуклеарный заряд приблизительно равен половине атомной массы, помноженной на заряд электрона. Вследствие трудности опыта действительное число можно было определить лишь с погрешностью, не превосходящей 20%.

Таким образом, экспериментальные результаты Гейгера и Марсдена оказались в полном согласии с предсказаниями теории и указали на то, что сделанная мною гипотеза о строении атома в существенных чертах правильна».

В какой мере были неожиданны результаты рассеяния α -частиц на большие углы и в какой мере они противоречили представлениям Дж. Дж. Томсона о строении атома, свидетельствуют следующие слова Резерфорда в одной из его публичных лекций [40, с. 136]:

«Это была, пожалуй, самая невероятная вещь, которая произошла в моей жизни. Это было столь же неправдоподобно, как если бы вы выстрелили 15-дюймовым артиллерийским снарядом в кусок папиросной бумаги и снаряд отразился бы назад и поразил вас. После размышлений я понял, что это рассеяние назад должно быть следствием единичного столкновения, и когда я выполнил расчет, то увидел, что невозможно было получить что-либо подобное по порядку величины, если не рассматривать систему, в которой большая часть массы атома сосредоточена в мельчайшем ядре».

В расчетах Резерфорда содержалось предположение о неподвижности рассеивающего центра, т. е. предположение, что масса ядра M рассеивающего элемента бесконечно велика по сравнению с массой m α -частицы. Это предположение достаточно хорошо оправдывается при изучении рассеяния α -частиц на атомах тяжелых элементов (золота, платины, серебра, меди и др.). Если же отношение m/M не очень мало, то теория рассеяния Резерфорда должна быть изменена. Это простое изменение, которое, по сути дела, сводится к замене массы m α -частицы приведенной массой $mM/(M+m)$, было сделано Ч. Дарвиным в 1914 г. Исследование рассеяния α -частиц на легких элементах (водороде, гелии, кислороде, азоте) хорошо подтвердило расчеты Дарвина, т. е. в конечном счете нуклеарную модель Резерфорда.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДА ЯДРА ИЗ ИССЛЕДОВАНИЙ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ

Изучение рассеяния α -частиц дает принципиальную возможность определения заряда ядра Z . Однако, фактически, точность этих опытов во времена Резерфорда позволила только утверждать, что числовое значение Z близко половине атомной массы элемента: $A/2$. Учитывая что в периодической системе элементов Менделеева атомы расположены почти без исключения в порядке возрастания их атомной массы, было бы естественно предположить, что порядковый номер элемента точно совпадает с зарядом ядра атома. Такая гипотеза была высказана Ван ден Брукком в 1913 г.

Однако подлинное доказательство этого было получено в замечательной работе ученика Резерфорда Генри Мозли (1887—1915 гг.). Мозли с 1910 г. работал в Манчестере в лаборатории Резерфорда. За короткое время своей научной деятельности он показал себя выдающимся исследователем. Мозли был убит в первую мировую войну в 1915 г. в галлиполийской военно-морской операции английского флота.

Непосредственно перед первой мировой войной Мозли опубликовал две работы по высокочастотным спектрам элементов [41], в которых доказал, что порядковый номер элемента в периодической системе Менделеева равен заряду ядра атома (в единицах e).

Хотя все, кто работал в лаборатории Резерфорда, занимались в это время рассеянием α -частиц, Мозли, как человек самостоятельного и оригинального ума, обращает свое внимание на характеристические рентгеновские спектры различных элементов. Работа Мозли логически продолжает работы Резерфорда по рассеянию α -частиц атомными ядрами. Однако она могла быть выполнена только после появления работы Бора, который в это время тоже работал в лаборатории Резерфорда.

Известно, что, наряду со сплошным рентгеновским спектром, связанным с торможением быстрых электронов в антикатоде рентгеновской трубки, наблюдается характеристический линейчатый рентгеновский спектр, состоящий из отдельных серий: K, L, \dots ; каждая серия состоит из отдельных групп линий: $\alpha, \beta, \gamma, \dots$, стремящихся к общей границе. Для разных антикатодов характеристические спектры схожи, обнаруживая систематический сдвиг в сторону больших частот по мере увеличения атомной массы элемента антикатада.

Для измерения частот длин волн характеристического рентгеновского спектра Мозли использовал соотношение Брэгга

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (2.1)$$

где n — порядок спектра, λ — длина волны, d — расстояние между атомными плоскостями и θ — угол скольжения ($90^\circ - \theta$ — угол падения) излучения.

Для спектра заданного порядка n при известном расстоянии d длина волны λ и угол скольжения θ связаны однозначно. Следовательно, рентгеновский спектрометр может быть проградуирован по углу θ ($\lambda = \lambda(\theta)$).

Мозли исследовал для одиннадцати последовательных элементов периодической системы Менделеева, от кальция (атомная масса $A = 40,09$) до цинка ($A = 65,37$), величину

$$Q = \sqrt{\frac{\nu}{(3/4)\nu_0}}, \quad (2.2)$$

где ν — частота линии характеристического спектра K_α , а

$$\nu_0 \equiv R = 2\pi^2 m e^4 / h^3 = 3,1 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1} \quad (2.3)$$

— постоянная Ридберга (см. (5.1.9)). При этом он обнаружил, что Q увеличивается на единицу при переходе к соседнему элементу периодической таблицы Менделеева (с большей атомной массой A).

Мозли дал объяснение этому, основанное на теории Бора для водородного спектра *).

Если линия K_α образуется при переходе из состояния $n_2 = 2$ в состояние $n_1 = 1$ водородоподобного спектра элемента с зарядом ядра $Z'e$, то, согласно (5.1.4) и (5.1.7),

$$\nu = \nu_0 Z'^2 (1/1^2 - 1/2^2) = (3/4) \nu_0 Z'^2, \quad (2.4)$$

где ν_0 — постоянная Ридберга (2.3), а Z' — эффективный заряд ядра, экранированный присутствием других электронов в « K -кольце» (K -оболочке). (При этом, очевидно, с хорошим приближением можно пренебречь влиянием наружных по отношению к K -оболочке электронов.) Дж. Никольсон показал, что

$$Z' = Z - \sigma_n, \quad (2.5)$$

где Ze — заряд ядра, а σ_n — величина, ответственная за эффект, связанный с отталкиванием электронов, симметрично расположенных в K -кольце.

Таким образом, из (2.4) и (2.5) находится величина

$$Z - \sigma_n = \sqrt{\frac{\nu}{(3/4)\nu_0}}, \quad (2.6)$$

которая совпадает с (2.2), если положить

$$Q = Z - \sigma_n. \quad (2.7)$$

Если считать, что Z равно порядковому номеру элемента, и определять его из разных серий K , L , ..., то Q , как это и оказалось на опыте, меняется на единицу при переходе к соседнему элементу периодической таблицы.

Из сравнения с опытом Мозли получил $\sigma_n \approx 1$; так как из расчета Никольсона $\sigma_n = 0,96$, то отсюда следовало бы, что на K -коль-

* Мозли уже знал работу Бора по квантовой теории водородоподобных атомов, изложенную нами в разделе 1 следующей главы. Мы немного упростим рассуждения Мозли.

це имеется четыре электрона. Сейчас мы знаем, что никаких колец электронов не существует, но в K -оболочке атома имеются два электрона в s -состоянии с противоположно направленными спинами. С этой точки зрения σ_n надо рассматривать как величину, характеризующую эффект экранирования ядра электронами, которые для K -оболочки не меняются при переходе от одного элемента к другому.

Мозли показал, что порядковый номер для кобальта равен $Z_{Co}=27$, а никеля $Z_{Ni}=28$, в то время как их атомные массы равны $A=58,97$ и $A=58,68$. Мы видим, что, в то время как порядковый номер возрастает, атомная масса уменьшается.

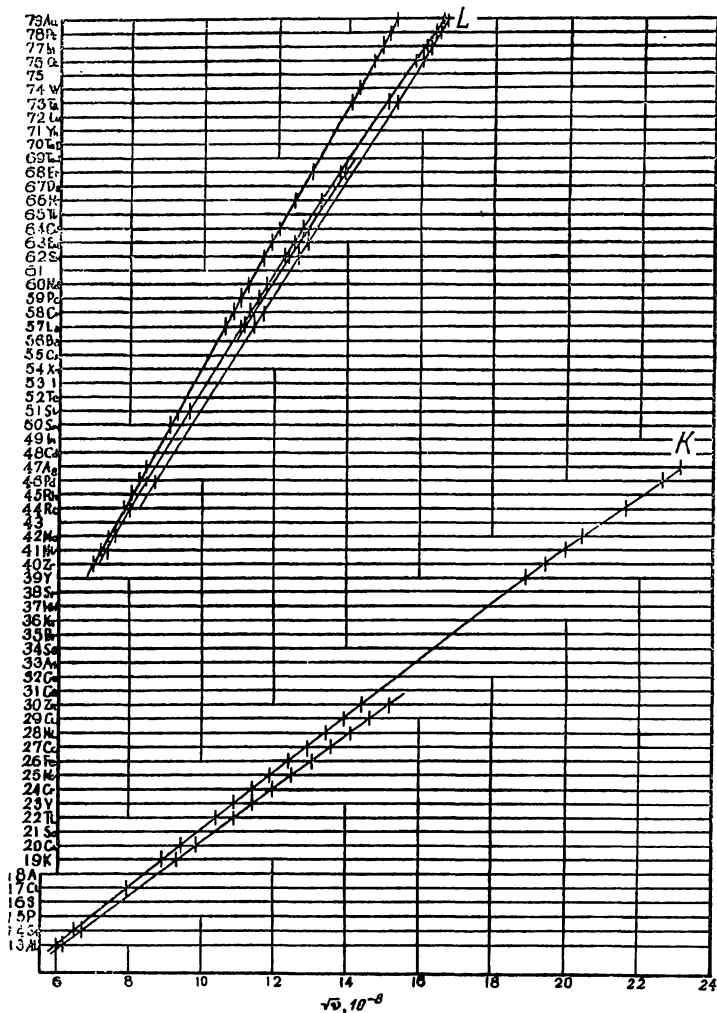


Рис. 5

Во второй части работы Мозли исследует тем же способом более тридцати элементов. При этом он рассматривает не только линию K_α , но и линию L_α , которая реализуется при переходах из состояния $n_2=3$ в состояние $n_1=2$; для линии L_α

$$Q = Z - \sigma_n = \sqrt{\frac{\nu}{(5/36)\nu_0}}, \quad (2.8)$$

так как $1/2^2 - 1/3^2 = 5/36$. Из опыта вытекает, что для линии L_α величина $\sigma_n = 7,4$.

На рис. 5, взятом из статьи Мозли, изображена зависимость $\sqrt{\nu}$ от Z для линий K_α , K_β (две нижние прямые) и L_α , L_β, \dots (верхние прямые). Исследованы все элементы периодической таблицы Менделеева от алюминия ($Z=13$) до золота ($Z=79$). Показано хорошее следование закону пропорциональности $\nu^{1/2}$ от Z ; разным линиям α , β , γ, \dots для одних и тех же элементов должны быть сопоставлены одинаковые значения Z . Обнаружено отсутствие элементов с порядковыми номерами Z , равными 43, 61 и 75; эти элементы были открыты впоследствии и названы: технеций ($Z=43$), прометий ($Z=61$) и рений ($Z=75$). Было обнаружено, что при переходе от аргона к калию порядковый номер Z возрастает на единицу, в то время как атомная масса уменьшается. Однако химические свойства «следуют» за порядковым номером, т. е. химические свойства элементов определяются числом Z . Аналогичная ситуация, как мы уже отметили, имеет место для кобальта и никеля, а также для теллура и иода. Так как в нейтральном атоме число электронов тоже равно Z , то отсюда вытекает, что химические свойства элемента определяются числом электронов, движущихся вокруг ядра.

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ АТОМОВ ПО БОРУ — ЗОММЕРФЕЛЬДУ

1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ БОРА АТОМА ВОДОРОДА

Экспериментальные результаты Резерфорда по рассеянию α -частиц атомными ядрами убедительно показали, что атомы состоят из массивного ядра малых размеров и «роя» электронов, движущихся вокруг него. Это поставило перед физиками трудную задачу, так как электроны, двигаясь в таком атоме с ускорением, должны были, с точки зрения классической электродинамики, непрерывно излучать электромагнитную энергию и атом должен был бы в короткое время разрушиться. Между тем вещество, состоящее из атомов, весьма стабильно, так что в отсутствие внешних воздействий атомы могут существовать сколь угодно долго.

Дж. Никольсон сделал в 1912 г. попытку применить к такому нуклеарному атому квантовые представления, однако результаты были неудачны. В 1913 г. молодой датский физик Нильс Бор, работавший в это время у Резерфорда, предложил квантовую теорию атома, которая в ряде важных своих черт оказалась правильной для атома водорода. Хотя впоследствии теория Бора была заменена строгой квантовой механикой, она представляется весьма важным этапом развития микрофизики.

Нильс Бор родился 7 октября 1885 г. в Копенгагене в семье профессора физиологии. В Копенгагене же он окончил среднюю школу и университет. В 1909 г. получил степень магистра, а в 1911 г. защитил докторскую диссертацию по электронной теории металлов.

С 1911 г. по 1914 г. проходила его длительная стажировка в Англии: вначале у Дж. Дж. Томсона в Кембридже, а затем у Резерфорда — в Манчестере. В 1913 г. Бор применил квантовые представления к нуклеарной модели атома водорода и достиг крупного успеха: выразил размеры атома через мировые константы (заряд и массу электрона и постоянную Планка) и дал теоретический вывод формулы Бальмера для спектральной серии атома водорода. Бор с исключительной глубиной проанализировал условия применения теории квантов к поведению атомов. Это сделало его центральной фигурой в развитии квантовой теории строения атомов.

С 1914 г. по 1916 г. Бор — преподаватель Манчестерского университета, с 1916 г. — профессор теоретической физики Копенгагенского университета и с 1920 г. — директор созданного им Института теоретической физики, который сыграл большую роль в международном общении физиков-теоретиков. Вокруг Бора создается выдающаяся школа молодых физиков-теоретиков (В. Гейзенберг, В. Паули, Х. Крамерс, Л. Д. Ландау, О. Клейн, Р. Пайерлс и др.).

В 1922 г. за создание квантовой теории планетарного атома Бору присуждается Нобелевская премия по физике.

Во второй половине 20-х годов Бор — центральная фигура среди тех, кто правильно интерпретирует квантовую механику; к этому же времени относится его дискуссия с Эйнштейном по эпистемологическим вопросам физики.

В 1929 г. Бор был избран иностранным членом АН СССР. Он не раз бывал в Советском Союзе. К числу его любимых учеников принадлежал советский физик Л. Д. Ландау.

В 1936 г. Бор создал теорию составного атомного ядра (ядра-капли), а в 1939 г. — теорию деления ядер (совместно с Дж. Уиллером).

Во время второй мировой войны Бор вел себя как мужественный антифашист.

Бор скончался в ноябре 1962 г. в возрасте 77 лет.

Мы переходим к изложению знаменитой работы Нильса Бора «О строении атомов и молекул» [42] (рус. пер. [43, т. I, с. 84]), в которой он дал квантовые правила для описания структуры водородоподобного (одноэлектронного) атома. Эта обширная работа, состоящая из трех частей (70 страниц!), содержит также рассмотрение многоэлектронных атомов и молекул. Однако соображения, относящиеся к этому, оказались в свете развитой впоследствии квантовой механики неправильными. Конечно, представления Бора, относящиеся к водородоподобным атомам, тоже оказались, с точки зрения квантово-механической картины микромира, не вполне корректными, но некоторые черты микромира были схвачены правильно.

Бор исходил из того непреложного факта, что опыты Резерфорда по рассеянию α -частиц могут быть объяснены только предположением, что атомы состоят из положительно заряженного массивного ядра с линейными размерами порядка 10^{-12} см и «роя» электронов, движущихся вокруг него в объеме атома с линейными размерами порядка 10^{-8} см. Тем самым Бор отвергает модель атома Дж. Дж. Томсона. Модель же атома Резерфорда приводит к противоречиям с классической электродинамикой и механикой, поэтому Бор существенно дополнил модель атома Резерфорда квантовыми представлениями.

Вначале Бор рассматривает простейшую систему: бесконечно тяжелое ядро с зарядом Ze (Z — порядковый номер элемента, e — элементарный заряд) и электрон массы m с зарядом $-e$. Под действием силы кулоновского притяжения, равной $-Ze^2/r^2$ (r — расстояние от электрона до ядра), электрон описывает эллиптическую орбиту. Частота обращения ν электрона и большая полуось a его эллиптической орбиты связаны с его отрицательной энергией связи ($E < 0$) следующим образом [44, с. 50]:

$$\nu = (\sqrt{2}/\pi) (|E|^{3/2} / Ze^2 m^{1/2}), \quad a = Ze^2 / 2 |E|. \quad (1.1)$$

Заметим также, что из теоремы вириала [44, с. 36] вытекает, что среднее значение кинетической энергии

$$\overline{mv^2} / 2 = (1/2) \overline{Ze^2/r} = |E|. \quad (1.2)$$

Поведение такой классической модели атома полностью противоречит тому, что наблюдается в природе. Такой электрон за корот-

кий промежуток времени излучил бы свою энергию и упал на ядро. В самом деле, полное излучение ускоренно движущегося электрона в секунду равно $J = 2e^2\omega^2/3c^3$, где c — скорость света, ω — ускорение электрона [45, с. 227].

Рассмотрим, для простоты, движение электрона вокруг ядра по круговой орбите радиуса a . Так как при круговом движении электрона центростремительная сила mv^2/a равна силе кулоновского притяжения e^2/a^2 , то $v^2 = e^2/ma$; поэтому ускорение электрона $\omega = v^2/a = e^2/ma^2$.

Из выражения (1.2) вытекает, что для рассматриваемой кулоновской системы модуль полной энергии $|E|$ равен половине среднего значения отрицательной потенциальной энергии $e^2/2a$. Поэтому время падения электрона на ядро по порядку величины равно

$$|E|/J = (e^2/2a)(3c^3/2e^2\omega^2) = 3c^3m^2a^3/4e^4.$$

Подставляя значения входящих сюда величин: $c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с, $m \approx \approx 10^{-27}$ г, $a \approx 10^{-8}$ см, получим для времени существования атома величину, меньшую 10^{-9} с. Мы видим, что через ничтожные доли секунды атомы должны были бы разрушиться.

Если бы мы даже ввели специальную гипотезу о том, что атомные электроны не излучают (что, собственно говоря, и сделал Бор), то все равно соотношение (1.1) находилось бы в противоречии с опытом. В самом деле, из (1.1) следует, что атомы одного элемента могли бы находиться во всевозможных состояниях с различными E , ν , a . Но из опыта известно, что все атомы одного элемента абсолютно одинаковы; это вытекает из идентичности спектров, энергии $|E|$, размеров атомов a .

Создавшееся затруднение Бор попытался разрешить, используя теорию Планка атомных осцилляторов, энергия которых может принимать только значения, кратные $nh\nu$, где h — постоянная Планка, ν — частота осциллятора и n — целое число. Бор рассматривает водородоподобный атом и принимает, что стационарная орбита электрона вблизи ядра есть окружность радиуса a . Если электрон, находящийся на бесконечности в покое, переходит на стационарную орбиту вблизи ядра, то излученная им энергия равна $W = |E|$. Далее Бор пишет: «Теперь допустим, что электрон испускает монохроматическое излучение с частотой, равной половине частоты обращения электрона по своей окончательной орбите», т. е.

$$W \equiv |E| = nh\nu/2. \quad (1.3)$$

Это предположение надо рассматривать, как квантовый постулат, который приводит к правильному значению для энергетических уровней атома.

Из трех уравнений — (1.1) и (1.3) — определим три величины: W , ν и a , а именно:

$$W = 2\pi^2mZ^2e^4/n^2h^2, \quad \nu = 4\pi^2mZ^2e^4/n^3h^3, \quad a = n^2h^2/4\pi^2mZe^2. \quad (1.4)$$

Для $n = 1, 2, 3, \dots$ мы получим ряд дискретных значений энергии W , частоты ν и радиуса орбиты a .

Наиболее глубокому уровню энергии соответствует наибольшее значение энергии W , т. е. $n=1$. Этому же соответствует наиболее устойчивое состояние атома. В этом случае для атома водорода ($Z=1$) получим следующие выражения:

$$W_0 = 2\pi^2 m e^4 / h^2 \approx 13 \text{ эВ}, \quad \nu_0 = 4\pi^2 m e^4 / h^3 \approx 6,2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}, \quad (1.5)$$

$$a_0 = h^2 / 4\pi^2 m e^2 \approx 0,56 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

Здесь Бор использовал уже известные в его время значения:

$$e = 4,7 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ}, \quad e/m = 5,31 \cdot 10^{17} \text{ СГСЭ/г}, \\ h = 6,5 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}. \quad (1.6)$$

Числовые значения (1.5) для W , ν и a по порядку величины хорошо соответствуют потенциалу ионизации, оптическим частотам и размерам атома водорода. Замечательным результатом этого подхода является то, что он позволяет определить атомные размеры только через мировые постоянные h , m и e .

Бор отмечает, что «на всеобщее значение теории Планка для обсуждения атомных систем впервые указал Эйнштейн».

А. Гааз и Дж. Никольсон пытались использовать квантовые представления для построения теории атома, однако не достигли при этом существенного успеха.

Дискретные состояния водородоподобного атома, даваемые выражениями (1.4), являются, по гипотезе Бора, стационарными, т. е. безызлучательными, вопреки законам классической электродинамики. Для того чтобы объяснить наличие атомных спектров, Бор делает предположение о том, что возможны спонтанные (т. е. самопроизвольные) переходы из состояния n_2 с большей энергией E_2 в состояние n_1 с меньшей энергией E_1 (очевидно, $n_2 > n_1$); при этом он считает, что при таком переходе испускается монохроматическое излучение частоты ν , равное

$$E_2 - E_1 = W_{n_1} - W_{n_2} = h\nu. \quad (1.7)$$

Отсюда и из (1.4) вытекает, что

$$\nu = (2\pi^2 m e^4 / h^3) Z^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2) = RZ^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2), \quad (1.8)$$

где R — так называемая постоянная Ридберга.

Далее Бор пишет:

«Мы видим, что это соотношение объясняет закономерность, связывающую линии спектра водорода. Если взять $Z=1$, $n_1=2$ и варьировать n_2 , то получим обычную серию Бальмера. Если взять $n_1=3$, получим в инфракрасной области серию, которую наблюдал Пашен и еще ранее предсказал Ритц. При $n_1=1$ и $n_2=4, 5, \dots$ получим в крайней ультрафиолетовой и, соответственно, в крайней инфракрасной областях серии, которые еще не наблюдались, но существование которых можно предположить».

Соответствие здесь как качественное, так и количественное. Если положить e , e/m и h равными (1.6), то получим

$$R = 2\pi^2 m e^4 / h^3 = 3,1 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}. \quad (1.9)$$

Эмпирическое значение множителя R вне скобки в формуле (1.8) равно $3,290 \cdot 10^{15}$. Соответствие между теоретическим и наблюдаемыми значениями лежит в пределах ошибок измерений постоянных, входящих в теоретическую формулу.

Можно заметить, что указанным способом нельзя получить другие серии, которые обычно приписываются водороду, например серию, которую впервые наблюдал Пикеринг в спектре звезды ζ Кормы, и группу серий, недавно наблюденных Фаулером при исследовании смеси водорода и гелия в вакуумных трубках. Мы увидим, однако, что с помощью описанной выше теории можно естественным образом объяснить эти серии, если приписать их гелию.

Нейтральный атом гелия состоит, согласно теории Резерфорда, из положительного ядра с зарядом $2e$ и двух электронов. Если рассматривать теперь ионизованный гелий с одним электроном, то, подставляя $Z=2$ в формулу (1.8) и поступая таким же образом, как раньше, получим частоту, равную

$$\nu = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3} 2^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left[\frac{1}{(n_1/2)^2} - \frac{1}{(n_2/2)^2} \right]. \quad (1.10)$$

Полагая в этой формуле $n_1=1$ или $n_1=2$, получаем серии линий в крайнем ультрафиолете. Если взять $n_1=3$ и варьировать n_2 , получим серию, включающую две из наблюдавшихся Фаулером серий; он назвал их первой и второй главными сериями спектра водорода. Если взять $n_1=4$, получим серию, которую Пикеринг наблюдал в спектре ζ Кормы. Каждая вторая линия в этой серии идентична с одной из линий серии Бальмера в спектре водорода».

Далее Бор показывает, что условие (1.3) для круговой орбиты эквивалентно квантованию момента импульса электрона. В самом деле, момент импульса электрона равен $M = mva$, тогда $\pi M = \pi mva = (mv^2/2) 2\pi a/v = T/v$, где T — кинетическая энергия. Для круговой орбиты $T=W$, поэтому из (1.3) следует $T = nh\nu/2$ или

$$M = n\hbar/2\pi, \quad (1.11)$$

т. е. момент импульса электрона равен целому, кратному от $\hbar/2\pi$. Отметим, что (1.11) вытекает из требования

$$\int p dq = nh, \quad (1.12)$$

где q и p — обобщенная координата и сопряженный ей импульс, а интегрирование ведется по замкнутому циклу периодического движения*). В нашем случае, для кругового движения электрона обобщенная координата q равна полярному углу ϕ , определяющему положение электрона на круговой орбите радиуса a ; тогда сопряженный координате ϕ импульс равен $p = M = mva$; оконча-

*) Идея такого квантования восходит к А. Зоммерфельду (1911 г.).

тельно имеем

$$\int p dq = M \int d\varphi = M 2\pi = nh,$$

что совпадает с (1.11).

В случае линейного гармонического осциллятора условие (1.12) приводит к квантовому условию Планка (1.1.20). В самом деле, в этом случае $p = mq$, где q — линейное отклонение осциллятора от положения равновесия; тогда

$$\int p dq = 2 \int_0^{\tau} \frac{mq^2}{2} dt = 2\bar{T}\tau,$$

где \bar{T} — среднее значение кинетической энергии, а τ — период колебания. Так как при гармоническом колебании $2\bar{T} = W$ — полной энергии, а частота колебаний $\nu = 1/\tau$, то из вышенаписанного следует (1.1.20).

Здесь были изложены все фундаментальные положения, содержащиеся в большой статье Бора. Остальная часть статьи содержит или повторения, или рассматривает атомы со многими электронами (расположенными на равных расстояниях вдоль окружности), или — молекулы с несколькими атомными ядрами. Однако сейчас известно, что для рассмотрения последних вопросов необходимо использовать квантовую механику, которая в 1913 г. еще не была создана. В дополнение я хотел бы изложить небольшую, но очень интересную работу Бора «Спектры водорода и гелия», опубликованную в том же 1913 г. [46] (рус. пер. [43, т. I, с. 149]). Говорят, что Эйнштейн поверил в «атом Бора» после появления этой статьи.

В этой работе Бор пишет: «Недавно Фаулер наблюдал некоторое число новых линий при сильном разряде в водородно-гелиевой смеси. Некоторые из этих линий очень близко расположены к линиям серии, которую наблюдал Пикеринг в спектре звезды ζ Кормы: вследствие ее простой связи с обычной серией Бальмера она была приписана водороду. Другие линии оказались близки к спектральной серии, которую предсказал Ридберг, назвавший ее главной серией водорода. Остальные новые линии имеют простую связь с последней названной серией, но явно не укладываются в теорию Ридберга».

Другими словами, в водородно-гелиевой смеси наблюдаются линии, очень близко совпадающие с линиями водорода, но слегка сдвинутые относительно них.

Из теории спектров Бора следует, что определенные линии ионизованного гелия (см. (1.10)) совпадают с линиями водорода (см. (1.8)). Бор показал, что если учесть конечную массу атомного ядра, то можно объяснить незначительные сдвиги линий, наблюдавшихся Фаулером, в точном количественном согласии с экспериментом.

Для того чтобы в задаче двух тел учесть конечную массу второго тела (ядра), надо массу первого тела (электрона) заменить

на приведенную массу, т. е. считать ее равной $mM/(M+m)$. Таким образом, в (1.8) (с $Z=1$) и (1.10) надо заменить m на $mM/(M+m)$ и на $4Mm/(4M+m)$, так как ядро гелия в 4 раза тяжелее ядра водорода. В результате (1.8) и (1.10) приобретут вид

$$\lambda (1/n_1^2 - 1/n_2^2) = ch^3 (M+m) / 2\pi^2 e^4 Mm \equiv K_H, \quad (1.13)$$

$$\lambda (1/n_1^2 - 1/n_2^2) = ch^3 (4M+m) / 2\pi^2 4e^4 4Mm \equiv K_{He}. \quad (1.13a)$$

Мы заменили частоту ν на длину волны $\lambda = c/\nu$. Из (1.13) и (1.13a) следует, что

$$K_H/K_{He} = 16(M+m)/(4M+m). \quad (1.14)$$

Так как $M = 1835m$, то

$$K_H/K_{He} = 4,00163. \quad (1.14a)$$

Если же для определения этого отношения из (1.13) и (1.13a) использовать экспериментальные спектроскопические данные, то получим

$$K_H/K_{He} = 4,0016 \quad (1.14b)$$

в точном согласии с теорией.

В заключение этого раздела мы изложим кратко замечательную работу по исследованию неупругих столкновений электронов с атомами. Эта работа, выполненная двумя молодыми берлинскими физиками Джеймсом Франком и Густавом Герцем, явилась непосредственным экспериментальным доказательством существования стационарных состояний в атоме.

Хотя эта работа была опубликована в 1914 г. [47], т. е. после появления основополагающей работы Бора по строению атомов (1913 г.), по-видимому, даже сам Бор не осознал вполне, что она является прямым экспериментальным подтверждением его радикальной гипотезы. За эту работу Дж. Франку и Г. Герцу была в 1925 г. присуждена Нобелевская премия.

Франк и Герц поставили перед собой задачу измерить потенциалы ионизации ряда атомов. В конце концов, после ряда неудачных попыток, они сконструировали аппаратуру, схематически изображенную на рис. 6. Накаленный катод K , сетка N и коллектор G были помещены в вакуумную трубку, заполненную парами ртути. Между катодом K и сеткой N прилагался потенциал V , ускоряющий электроны, испускаемые катодом.

G —————
 N - - - - -

Между сеткой N и коллектором G прилагался постоянный потенциал V_c , замедляющий электроны при их движении к коллектору.

K —————

Пока $V > V_c$, ток через коллектор равен нулю. Когда V становится равным V_c и продолжает увеличиваться, ток через коллектор растет; это продолжается до тех пор, пока V не возрастет до значения V_i , при котором происходит неупругое столкновение электрона с атомом (Франк и Герц считали, что это

Рис. 6

ионизация атома). В результате ток через коллектор начинает уменьшаться. Если вероятность такого неупругого столкновения достаточно велика, то, в конце концов, заметная часть электронов теряет свою скорость и ток через коллектор существенно уменьшается.

При дальнейшем увеличении потенциала V последний становится больше $V_i + V_c$ и ток через коллектор вновь возрастает; однако при $V = 2V_i$ ток через коллектор опять уменьшается и мы получаем второй максимум тока. При $V = 3V_i$ должен наблюдаться третий максимум и так далее.

Действительно, Франк и Герц наблюдали картину, изображенную на рис. 7. Измеренный таким образом «потенциал ионизации» V_i для атомов ртути оказался равным 4,9 В. Однако дальнейшие исследования заставили сомневаться в том, что в этом случае действительно измеряется потенциал ионизации. В частности, нигде не наблюдались положительные ионы атомов ртути. На самом деле опыты Франка и Герца свидетельствуют только о том, что в результате не-

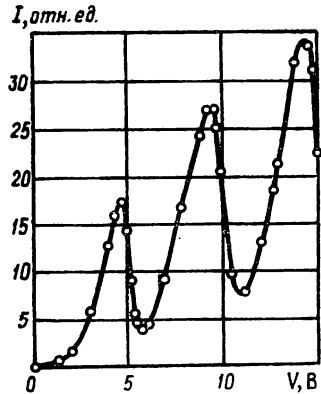


Рис. 7

упругого столкновения электрона с атомом ртути последнему передается всегда одна и та же энергия, равная 4,9 В. Но ведь это как раз и может быть истолковано, в согласии с теорией Бора, как переход атома из одного стационарного состояния в более высокое.

2. ЭЛЛИПТИЧЕСКИЕ ОРБИТЫ ЭЛЕКТРОНА В АТОМЕ ВОДОРОДА

Линейный гармонический осциллятор и атом водорода, в котором электрон описывает круговую орбиту, представляют собой примеры механических систем с одной степенью свободы.

Как же следует поступать в квантовой теории при рассмотрении систем с несколькими степенями свободы, например в случае атома водорода, в котором электрон описывает эллиптическую орбиту? На этот вопрос ответил в 1916 г. немецкий теоретик Арнольд Зоммерфельд (одновременно, но несколько менее полно рассмотрел этот вопрос В. Вильсон).

Я буду следовать известной книге [48, с. 122] (рус. пер. [49]). Она отражает точки зрения, которые господствовали до создания современной квантовой механики в 1925—1927 гг.

Зоммерфельд указывает во 2-й главе своей книги, что при рассмотрении систем с несколькими степенями свободы следует перенести условие (1.12) на каждую отдельную степень свободы,

т. е. записать значение фазового интеграла для k -й степени свободы как целочисленное значение от h :

$$\int p_k dq_k = n_k h. \quad (2.1)$$

Здесь p_k — обобщенный импульс, сопряженный с координатой q_k , $n_k = 1, 2, 3, \dots$; интегрирование ведется по области периодического изменения q_k .

Конечно, квантовые условия (2.1) зависят от выбора обобщенных координат механической системы; поэтому до определенного выбора квантовое условие (2.1) остается неопределенным. По этому поводу Зоммерфельд замечает, что в простейших случаях, которые только и рассматриваются ниже, соответствующие координаты «напрашиваются сами собой». Я бы сказал, что выбор их оправдывается успехом результатов.

Для того чтобы (2.1) имело определенный смысл, нужно, чтобы обобщенный импульс p_k зависел только от своей обобщенной координаты q_k . Такие механические системы получили название систем с разделяющимися переменными или условно периодических систем.

Зоммерфельд пишет, что «как действовать в случае систем, не попадающих в этот класс, пока неизвестно». Бор считал, что в этом случае возможно продвижение, если воспользоваться методами теории возмущений небесной механики. Эти работы не сыграли существенной роли в развитии современной квантовой механики, поэтому мы на них останавливаться не будем.

В качестве примера квантовой системы с двумя степенями свободы рассмотрим эллиптическое движение электрона в атоме водорода. В качестве обобщенных координат, описывающих движение электрона вокруг бесконечно тяжелого ядра, выберем радиус-вектор r и полярный угол φ (начало координат совпадает с ядром). Кинетическая и потенциальная энергия электрона равны

$$T = (m/2)(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2), \quad U = -e^2/r. \quad (2.2)$$

Отсюда следует, что обобщенные импульсы равны

$$p_\varphi = \partial T / \partial \dot{\varphi} = m r^2 \dot{\varphi}, \quad p_r = \partial T / \partial \dot{r} = m \dot{r}. \quad (2.3)$$

Из закона равенства площадей вытекает, что

$$p_\varphi = m r^2 \dot{\varphi} = \text{const} \equiv M. \quad (2.4)$$

Поэтому мы имеем систему с разделяющимися переменными (т. е. на самом деле p_φ от r не зависит).

Квантовые условия (2.1) имеют вид

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = M \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi M = k h, \quad \oint p_r dr = \oint m \dot{r} dr = n' h. \quad (2.5)$$

Первое условие и квантовое число k называют азимутальными, второе условие и квантовое число n' — радиальными. Отсюда

следует, что

$$(k+n')h = \int m r^2 \dot{\varphi} d\varphi + \int m \dot{r} dr = \\ = \int_0^\tau m (r^2 \dot{\varphi}^2 + \dot{r}^2) dt = 2 \int_0^\tau T dt = 2\tau \bar{T}, \quad (2.6)$$

где τ — период движения и \bar{T} — средняя кинетическая энергия электрона.

В случае кулоновского взаимодействия по теореме вириала [44, с. 36]

$$2\bar{T} = -\bar{U}, \quad (2.7)$$

где \bar{U} — средняя потенциальная энергия электрона; поэтому его полная энергия равна

$$\bar{T} + \bar{U} = -\bar{T} = -(h/2\tau)(k+n') = -n(h\nu/2). \quad (2.8)$$

Здесь частота обращения электрона $\nu = 1/\tau$ и главное квантовое число $n = k+n'$; так как (2.8) совпадает с (1.3), то из (2.8) и (1.1), которое справедливо для эллиптического движения, вытекает (1.4), т. е.

$$|E| = W = 2\pi^2 m e^4 / (k+n')^2 h^2 = R/n^2 h^2, \quad (2.9)$$

где R — постоянная Ридберга (1.9).

Взяв выражения для полуосей эллипса a и b [44, с. 50], получим, что их отношение равно

$$b/a = 2M|E|^{1/2}/e^2(2m)^{1/2} = k/n, \quad (2.10)$$

где использовано (2.5) и (2.9). Мы видим, что главное квантовое число n определяет энергию электрона, а азимутальное квантовое число k — форму его эллиптической орбиты.

То, что при эллиптическом движении электрона в атоме водорода энергетические термы (2.9) совпадают с энергетическими термами (1.4), определенными Бором при рассмотрении круговых орбит, представляется весьма важным. В самом деле, это означает, что и при наиболее общем движении электрона в атоме водорода его спектр соответствует тому, что наблюдается на опыте. Зоммерфельд пишет: «Это результат огромного значения и впечатляющей простоты».

Из (2.10) следует, что азимутальное квантовое число k определяет форму (эксцентриситет) эллиптической орбиты. Хотя этот результат и имеет некоторую аналогию с формой электронного облака, определяемого из квантовой механики, особого применения и развития этот результат не получил. Зоммерфельд исключает случай $k=0$, т. е. $M=0$ (см. (2.5)), так как в этом случае траектория электрона — прямой отрезок, проходящий через ядро атома (см. (2.10)).

Альберт Рубинович, работавший в Мюнхене у Зоммерфельда, исследовал вопрос о правилах отбора для азимутального квантового числа k [1, в. II, р. 131]. Он показал, что при излучении фо-

тона переходы возможны не между произвольными эллиптическими орбитами. Некоторые переходы оказываются запрещенными, т. е. существуют определенные правила отбора для азимутального квантового числа k . На первый взгляд это обстоятельство кажется несущественным, так как энергетические термы атома водорода определяются главным квантовым числом $n = k + n'$; однако в ряде случаев, например при рассмотрении квантовой теории эффекта Зеемана, указанные правила отбора существенны (см. раздел 5).

Рассматривая излучение атома при переходе электрона с одной эллиптической орбиты на другую, Рубинович отметил, что момент импульса электрона M меняется при этом на величину

$$\Delta M = (k - k') \hbar / 2\pi = (k - k') \hbar,$$

как это следует из (2.5).

С другой стороны, полный момент импульса, включая момент импульса излученного фотона, должен оставаться постоянным. Посредством аргументов частично классического и частично квантового характера Рубинович показал, что момент импульса линейно поляризованного фотона равен нулю, а циркулярно поляризованного — \hbar . Таким образом,

$$k - k' = 1, 0 \text{ или } -1. \quad (2.11)$$

В этом и заключаются правила отбора для азимутального квантового числа k .

Независимо правила отбора (2.11) были получены Бором, использовавшим для этого принцип соответствия.

3. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ КВАНТОВАНИЕ

Можно рассмотреть движение электрона в атоме водорода, учитывая все три степени свободы электрона; это приводит к представлению о пространственном квантовании, под которым понимается выделение некоторых дискретных ориентаций плоскости орбиты в пространстве. Конечно, такое выделение ориентаций плоскости орбиты электрона возможно только по отношению к некоторому внешнему полю. Мы будем считать это поле бесконечно малым для того, чтобы оно не возмущало движения электрона по эллиптической орбите.

Обобщим выражение (2.6), связывающее среднюю кинетическую энергию электрона T с фазовыми интегралами. В общем случае для механической системы кинетическая энергия [44, с. 166] равна

$$T = (1/2) \sum_i p_i \dot{q}_i, \quad (3.1)$$

где для консервативной системы обобщенные импульсы равны $p_i = \partial T / \partial \dot{q}_i$. Интегрируя (3.1) по времени за период τ , получим вы-

ражение

$$2 \int_0^{\tau} T dt = 2\tau\bar{T} = \sum_i \int p_i dq_i, \quad (3.2)$$

которое является прямым обобщением (2.6).

Рассмотрим движение электрона в пространственных полярных координатах r, θ, ψ . На рис. 8 изображена единичная сфера, описанная вокруг ядра атома O ; полярная ось ON совпадает с направлением слабого поля, BKA — пересечение плоскости орбиты со сферой, OK — линия узлов, OP — единичный вектор, определяющий направление радиус-вектора r электрона, $r, \Psi =$ полярные координаты электрона в плоскости его движения, OM — направление момента импульса электрона p , α — угол наклона p к полярной оси ON (или угол наклона плоскости движения к экваториальной плоскости).

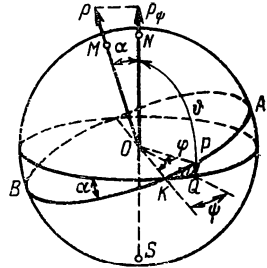


Рис. 8

Квантуя движение по всем трем степеням свободы, получим

$$\int p_r dr = n'h, \quad \int p_\psi d\psi = k_1 h, \quad \int p_\theta d\theta = k_2 h. \quad (3.3)$$

С точки зрения плоского эллиптического движения (2.5), мы имеем

$$\int p_r dr = n'h, \quad \int p_\psi d\psi = 2\pi p = kh, \quad (3.4)$$

так как $p_\psi = p = \text{const}$ в поле центральных сил. Используя эти выражения и (3.2), получим

$$2\tau\bar{T} = \sum_i \int p_i dq_i = n'h + k_1 h + k_2 h = n'h + kh,$$

откуда

$$k_1 + k_2 = k. \quad (3.5)$$

Проектируя момент импульса p на полярную ось, получим $p_\psi = p \cos \alpha$, откуда следует, что p_ψ так же, как и p , константа движения; тогда из (3.3) следует $p_\psi 2\pi = k_1 h$, таким образом,

$$\cos \alpha = p_\psi / p = k_1 / k. \quad (3.6)$$

Из (3.5) и (3.6) вытекает, что

$$\cos \alpha = k_1 / k = k_1 / (k_1 + k_2). \quad (3.7)$$

Рассмотрим три значения: $k = k_1 + k_2 = 1, 2, 3$. На рис. 9, a — ϵ представлены все три случая. Окружности изображают меридиональные сечения. Вертикальные диаметры совпадают с полярной осью ON . Вектор p изображается стрелками в таком масштабе, чтобы его проекция на вертикальный диаметр (т. е. ось ON) была целым числом (в случае a единица равна радиусу, в случае b —

половине радиуса, в случае ν — трети радиуса). Так как вращение электрона по орбите может происходить в двух противоположных направлениях, то наряду с векторами \mathbf{p} нанесены векторы $-\mathbf{p}$.

Рассмотрим первый случай.

- а) $k=1, k_1=1, k_2=0$, т. е. $\cos \alpha=1$,
 $k_1=0, k_2=1$, т. е. $\cos \alpha=0$.

Первое значение косинуса соответствует $\alpha=0$ и $\alpha=\pi$ (так как при вращении электрона в обратном направлении \mathbf{p} меняет свое направление на противоположное). Второе значение косинуса, соот-

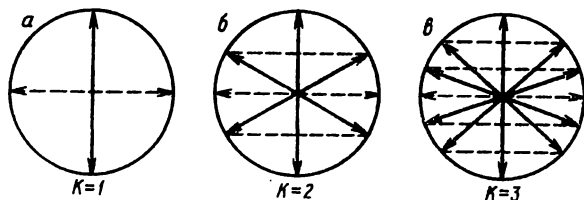


Рис. 9

ветствующее $\alpha=\pi/2$, Зоммерфельд исключает на основании соображений, аналогичных исключению случая $k=0$ в (2.10).

На рис. 9, а представлены обе возможности, причем нереализующиеся направления момента импульса \mathbf{p} изображены штриховыми стрелками.

Рассмотрим второй случай.

- б) $k=2, k_1=2, k_2=0$, т. е. $\cos \alpha=1$,
 $k_1=1, k_2=1$, т. е. $\cos \alpha=1/2$.

Обе возможности изображены на рис. 9, б. Третье возможное значение ($k_1=0, k_2=2$) исключается так же, как и в первом случае. Пространственные ориентации \mathbf{p} реализуются посредством соответствующих круговых конусов.

И, наконец, последний случай.

в) $k=3$. Кроме параллельной и антипараллельной ориентации ($\cos \alpha=1$) возникают еще наклоны: $\cos \alpha=2/3$ и $1/3$ (рис. 9, в).

Легко распространить эти рассуждения и на большие значения k .

В каждой плоскости, определяемой отношением (3.7), возможны круговая и эллиптическая орбиты.

Из (3.6) следует, что $|k_1| \leq k$. Так как впоследствии выяснилось, что $k_1=0$ тоже возможно, то k_1 может принимать значения, равные: $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k$, т. е. всего $2k+1$ значений.

Далее Зоммерфельд пишет: «Бесспорно, пространственное квантование кеплеровских орбит принадлежит к самым неожиданным следствиям квантовой теории. По простоте вывода и результатов оно представляется почти волшебством».

Из классической электронной теории известно [24, с. 101], что с моментом импульса связан магнитный момент

$$\mu = (e/2mc) p. \quad (3.8)$$

Отношение μ/p получило название гиромангнитного отношения.

Из квантовой теории мы видели, что $p = \hbar k/2\pi$, поэтому

$$\mu = (eh/4\pi mc) k = \mu_B \hbar k. \quad (3.9)$$

Величину

$$\mu_B = eh/4\pi mc = e\hbar/2mc = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}, \quad (3.9a)$$

представляющую наименьший магнитный момент, называют магнетоном Бора.

При наличии внешнего магнитного поля магнитные моменты μ будут прецессировать вокруг направления поля под углами α , определяемыми условиями пространственного квантования (3.7). Средняя составляющая μ , параллельная (антипараллельная) полю, определяется квантовым числом k (которое, как утверждал Зоммерфельд, не может равняться нулю).

Далее Зоммерфельд пишет:

«Как обстоит дело с эмпирическим доказательством пространственного квантования? В первую очередь надо сказать, что, по сути дела, каждая картина зеемановского расщепления дает такое доказательство... Если даже модельное представление общего (аномального) эффекта Зеемана доставляет еще большие затруднения, то все же нет сомнений, что различные компоненты зеемановской картины соответствуют различным пространственным положениям магнитного момента атома...»

Правда, такое не совсем прямое доказательство менее убедительно для экспериментаторов, чем для теоретиков. Однако недавно было получено непосредственное экспериментальное доказательство ориентации магнитных моментов атомов серебра в магнитном поле. Эти опыты были выполнены в Германии Отто Штерном и Вальтером Герлахом [50, 51].»

Опишем кратко идею опыта и его интерпретацию. В однородном магнитном поле результирующая сила, действующая на диполь, имеющий магнитный момент μ , равна нулю. В неоднородном поле напряженности $H(x, y, z)$ на диполь действует сила [4]

$$f = \mu \nabla H = \mu_x (\partial H / \partial x) + \mu_y (\partial H / \partial y) + \mu_z (\partial H / \partial z).$$

Если поле напряженности H направлено по оси z , то диполь прецессирует вокруг поля и среднее значение $\bar{\mu}_x = \bar{\mu}_y = 0$, поэтому

$$\bar{f} = \mu_z (\partial H / \partial z) = \mu (\partial H / \partial z) \cos(\mu, H).$$

При положительном $\cos(\mu, H)$ сила направлена вдоль поля, при отрицательном — против поля. Авторы пропускали тонкий пучок атомов серебра в направлении, перпендикулярном полю. Пучок расщеплялся на две составляющие, что интерпретировалось как случай $k=1$ ($k_1=1, k_2=0$), т. е. $\alpha = (\mu, H) = 0$ и π . Авторы по этому поводу пишут: «Мы видим в этих результатах прямое экспе-

риментальное доказательство квантования направления в магнитном поле».

Последующее развитие физических представлений и теории показало, что k_1 может равняться не только целому, но и полуцелому числу (спин!); кроме того, составляющая орбитального момента импульса вдоль поля может равняться нулю. Поэтому совпадение результатов опыта с несовершенной квантовой теорией 1921 г. может рассматриваться в некотором смысле как случайность. В частности, если бы авторы опыта использовали не атомы серебра, а атомы серы, то пучок расщепился бы на пять компонент, причем ни одна из них не испытала бы отклонения.

4. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ

В водородоподобных атомах энергия электрона полностью определяется главным квантовым числом $n = k + n'$ (2.8), где k — азимутальное квантовое число, определяющее момент импульса электрона (2.5), а n' — радиальное квантовое число. Зоммерфельд исключил состояние $k=0$, так как оно соответствует электрону, «проходящему сквозь ядро атома» (см. (2.10)).

Дальнейшее изучение вопроса, в частности в современной квантовой механике, показало, что состояния с моментом импульса, равным нулю, возможны; они соответствуют сферически-симметричному состоянию электрона около ядра атома. Мы обозначим орбитальное квантовое число, определяющее момент импульса электрона, через $l = k - 1$ и будем считать, что оно может принимать следующие числовые значения: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. В современной квантовой механике момент импульса электрона равен $\hbar [l(l+1)]^{1/2} = \hbar (lk)^{1/2}$, т. е. при больших l действительно равен $\hbar l$.

При переходе к атомам с большим числом электронов, но с одним оптическим электроном (Li, Na, K, Rb, Cs) ситуация усложняется: оптический электрон испытывает воздействие не только ядра, но и остальных электронов, образующих атомный остов. В результате этого энергия оптического электрона зависит не только от главного квантового числа n , но и от квантового числа l . Например, в спектре натрия наблюдаются четыре серии, соответствующие $l = 0, 1, 2, 3$, получившие название: резкая (sharp), главная (principal), диффузная (diffuse) и фундаментальная (fundamental); этим сериям соответствуют термы $R/(n+s)^2$, $R/(n+p)^2$, $R/(n+d)^2$, $R/(n+f)^2$, где R — постоянная Ридберга, n — главное квантовое число, s, p, d, f — правильные дроби. Принято говорить, что $l = 0, 1, 2, 3$ соответствуют s -, p -, d -, f -состояниям электрона.

Наблюдения показывают, что только s -серия синглетна, т. е. состоит из отдельных спектральных линий; серии же p, d, f, \dots дублетны, т. е. состоят из двух близких линий. В частности, дублетную природу известной желтой D -линии можно наблюдать посредством простейших спектроскопических приборов, так как расщепление в ней довольно значительно и равно 6 Å.

Чтобы объяснить дублетную природу линий, Зоммерфельд ввел в 1920 г. третье квантовое число j , которое он назвал внутренним квантовым числом. Зоммерфельд предположил, что полный момент импульса атома щелочного металла в единицах \hbar равен $j = (l + s)$, где $s = 1/2$ момента импульса атомного остова, который, согласно правилам пространственного квантования, либо параллелен, либо антипараллелен моменту оптического электрона l ; в самом деле, по правилам пространственного квантования, число ориентаций момента по отношению к выделенному направлению равно $(2s + 1) = 2(1/2) + 1 = 2$ (см. следствие из (3.6)). Таким образом, компоненты дублета связаны со значениями $j = l - 1/2$ и $j = l + 1/2$. При этом s -серия ($l = 0$) синглетна, так как внутреннее квантовое число j не может быть отрицательным и в s -состоянии имеет только значение $j = s = 1/2$.

В спектрах щелочно-земельных элементов наблюдаются серии триплетов, для интерпретации которых делается предположение, что s имеет значения 0 и ± 1 , что для полного момента импульса или внутреннего квантового числа дает три возможности: $j = l - 1$, $j = l$ и $j = l + 1$.

Эти соображения могут быть обобщены и на более сложные случаи. Однако, как было показано Вольфгангом Паули, предположение о том, что атомный остов обладает моментом импульса s , находится в противоречии с тем, что наблюдается для эффекта Зеемана, эффект в этом случае должен был бы зависеть от атомного номера элемента.

Паули предположил, что момент импульса s связан с новым квантово-теоретическим свойством электрона, которое Паули назвал «двузначностью, не описываемой классически». Паули подошел здесь поразительно близко к открытию спина электрона, которое было бы признано за ним, если бы он с большей определенностью настаивал на своей идее.

В 20-х годах периодическая система элементов имела вид, изображенный на табл. 1. Она была в менее полном виде открыта Д. И. Менделеевым в 1869 г. В то время не были известны благородные газы и ряд элементов, открытых позже (некоторые из них были предсказаны Менделеевым на основании его таблицы).

Принцип построения таблицы следующий. Элементы располагаются по горизонтали в порядке возрастания их атомной массы (точнее, атомного номера Z) и обрываются в определенных местах, так чтобы сходные по химическим свойствам элементы были расположены в вертикальных столбцах. Из табл. 1 видно, что она состоит из семи горизонтальных периодов (1—7) и восьми вертикальных столбцов (I—VIII). Цифры перед химическим символом элемента обозначают его порядковый номер Z , равный положительному заряду ядра в единицах e (или числу электронов в соответствующем нейтральном атоме); цифры под символом элемента обозначают атомную массу, если принять атомную массу кислорода равной 16.

Таблица 1

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H 1,008							2 He 4,00
2	3 Li 6,94	4 Be 9,01	5 B 10,82	6 C 12,00	7 N 14,008	8 O 16,000	9 F 19,00	10 Ne 20,2
3	11 Na 23,00	12 Mg 24,32	13 Al 27,1	14 Si 28,06	15 P 31,04	16 S 32,07	17 Cl 35,46	18 Ar 39,88
→ 4	19 K 39,10	20 Ca 40,07	21 Sc 45,1	22 Ti 48,1	23 V 51,0	24 Cr 52,0	25 Mn 54,93	26 Fe 27 Co 28 Ni 39,88 55,84 58,97 58,68
	29 Cu 63,57	30 Zn 65,37	31 Ga 69,72	32 Ge 72,5	33 As 74,96	34 Se 79,2	35 Br 79,92	36 Kr 82,9
5	37 Rb 85,45	38 Sr 87,63	39 Y 88,7	40 Zr 90,6	41 Nb 93,5	42 Mo 96,0	43* 97,9	44 Ru 45 Rh 46 Pd 101,7 102,9 106,7
	47 Ag 107,88	48 Cd 112,4	49 In 114,8	50 Sn 118,7	51 Sb 121,8	52 Te 127,5	53 J ↔ 126,92	54 X 130,2
6	55 Cs 132,8	56 Ba 137,4	57 La 138,9	72 Hf 179±1	73 Ta 181,5	74 W 184,0	75* 186,2	76 Os 77 Ir 78 Pt 190,9 193,1 195,2
	79 Au 197,2	80 Hg 200,6	81 Tl 204,4	82 Pb 207,2	83 Bi 209,0	84 Po (210,0)	85* (210,0)	86 Em (222,0)
7	87* (223,0)	88 Ra 226,0	89 Ac (226)	90 Th 232,1	↔ 91 Pa (230)	92 U 238,2		

58 Ce 140,2	59 Pr 140,9	60 Nd 144,3	61* (147,0)	62 Sm 150,4	63 Eu 152,0	64 Gd 157,3
65 Tb 159,2	66 Dy 162,5	67 Ho 163,5	68 Er 167,7	69 Tu 169,4	70 Yb 173,5	71 Cp 175,0

Мы видим, что 1-й период состоит только из двух элементов: водорода (H) и гелия (He), 2-й — из 8 элементов, начиная с лития (Li) и кончая неоном (Ne), 3-й — тоже из 8 элементов, начиная с натрия (Na) и кончая аргоном (Ar), 4-й — из 18 элементов, начиная с калия (K) и кончая криптоном (Kr), 5-й — тоже из 18 элементов, начиная с рубидия (Rb) и кончая ксеноном (X), 6-й — из 32 элементов, начиная с цезия (Cs) и кончая эманацией (Em); однако эффективно разных химических элементов в 6-м периоде только 18, так как в него входит однородная группа 14 редкоземельных элементов (от церия (Ce) до лютеция (Lu)). Наконец, последний 7-й период содержал в то время только 5 элементов и заканчивался ураном с $Z=92$ и атомной массой, равной 238,2.

После блестящего успеха применения квантовой теории к атому водорода, было естественно попытаться интерпретировать на языке этой теории закономерности периодической системы элементов. Это и было сделано Бором в его докладе, прочитанном 18 октября 1921 г. в Физическом обществе в Копенгагене (рус. пер. [43, т. I, с. 318]).

Бор пытается интерпретировать периодическую систему элементов, используя химические и спектроскопические данные и квантовую теорию водородоподобного атома. При этом он к ядру атома с зарядом Ze последовательно прибавляет Z электронов, располагая их по различным орбитам. Как он сам указывает, «при этом приходится ставить вопрос так: как может быть образован атом при последовательном присоединении и связывании отдельных электронов в силовом поле ядра?»

Еще Ридберг отметил, что периоды таблицы Менделеева 2, 8, 18, 32 могут быть получены из выражения $2n^2$, если полагать $n=1, 2, 3, 4$. Это могло бы быть в некотором смысле обосновано, если подсчитать число состояний электрона в атоме, соответствующее главному квантовому числу n . Число состояний электрона с квантовыми числами (n, l, j) равно $2(2l+1)$, поскольку число пространственных ориентаций момента l равно $2l+1$, а $j=l\pm 1/2$. С другой стороны, из (2.8) видно, что $l=0, 1, 2, \dots, n-1$; таким образом, число состояний с главным квантовым числом n равно

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2(1+3+5+\dots+(2n-1)) = 2n^2.$$

Таким образом, если бы каждому периоду таблицы Менделеева соответствовало свое главное квантовое число n , то числа 2, 8, 18, 32 получили бы естественное объяснение. Однако на самом деле периоды равны 2, 8, 8, 18, 18, 32. Для того чтобы понять, с чем это связано, рассмотрим периодическую систему элементов подробнее. Обозначим через n_k орбиту электрона в атоме с главным квантовым числом n и азимутальным квантовым числом k .

Атом водорода с зарядом ядра $+e$ имеет один электрон, который в основном состоянии находится на круговой орбите 1_1 , с квантовыми числами $n=1$ и $k=1$ (теперь мы сказали бы в состо-

янии $1s$ с $n=1$ и $l=k-1=0$). Атом гелия химически чрезвычайно инертен, поэтому можно думать, что его два электрона вращаются по круговым орбитам 1_1 , образуя симметричную конфигурацию. Состояния с $n=1, 2, 3, 4, 5, 6$ обозначаются в атоме как $K-, L-, M-, N-, O-, P$ -оболочки (эти обозначения заимствованы из рентгеновской спектроскопии). По своим оптическим и химическим свойствам литий помещается в таблице под водородом. Два электрона в литии, так же как и в гелии, связаны в K -оболочке; третий валентный электрон, более слабо связанный с атомом, помещают в состояние с $n=2$ на орбиту 2_1 , т. е. в L -оболочку в состоянии $2s$. Для углерода с $Z=6$ Бор, исходя из его тетраэдрически направленной валентности, располагает 4 добавочных электрона в L -оболочке по четырем орбитам 2_1 , плоскости которых перпендикулярны пространственным диагоналям тетраэдра; такое расположение всех 4 электронов в состоянии $2s$ противоречит принципу Паули, который Бору был неизвестен. Восемь добавочных электронов инертного неона Бор располагает в L -оболочке; 4 электрона по орбитам 2_1 и 4 электрона по орбитам 2_2 ; согласно современной точке зрения на орбите 2_1 или $2s$ могут находиться только 2 электрона, а на орбите 2_2 или $2p$ — 6 электронов.

Следующий элемент Na с $Z=11$, как свидетельствуют его оптические и химические свойства, следует поместить под Li ; его валентный электрон попадает уже в M -оболочку с $n=3$ и движется по орбите 3_1 (т. е. в состоянии $3s$). Однако третий период содержит не 18 элементов, а только 8 и заканчивается аргоном с $Z=18$. Следующий, четвертый период начинается с калия ($Z=19$). С чем это связано? В связи с этим Бор специально отмечает, что на энергию валентного, движущегося по вытянутому эллипсу электрона щелочного металла (Li, Na, K, \dots) оказывает влияние то, что при его приближении к ядру электрон проникает в замкнутую электронную оболочку, окружающую ядро, и взаимодействует с ней; только на больших расстояниях от ядра валентный электрон подвергается действию поля экранированного ядра с зарядом $(Z-1)e$. Это приводит к тому, что энергия оптически активного валентного электрона зависит не только от главного квантового числа n (как это имеет место в водородоподобном атоме), но и от азимутального квантового числа k . Вообще следует учесть, что состояние n_k может обладать меньшей энергией, чем состояние n'_k , при $n > n'$ и $k < k'$. Именно это и имеет место для калия ($Z=19$), начинающего четвертый период. Его 19-й электрон не продолжает заполнение M -оболочки (состояние $3d$), а переходит в N -оболочку в состояние $4s$, и связано это с тем, что $E_{4s} < E_{3d}$.

Используя химические, оптические и теоретические аргументы, Бор строит периодическую систему элементов, заполняя электронами орбиты n_k . В табл. 2 приведено заполнение электронных состояний для цезия с $Z=55$. Первая строка нумерует электронные орбиты n_k , вторая — те же состояния в современных обозначениях, третья — заполнение состояний по Бору и четвертая — фактиче-

Таблица 2

1 ₁	2 ₁	2 ₂	3 ₁	3 ₂	3 ₃	4 ₁	4 ₂	4 ₃	4 ₄	5 ₁	5 ₂	5 ₃	5 ₄	5 ₅	6 ₁	6 ₂	...
1 _s	2 _s	2 _p	3 _s	3 _p	3 _d	4 _s	4 _p	4 _d	4 _f	5 _s	5 _p	5 _d	5 _f	5 _g	6 _s	6 _p	
2	4	4	6	6	6	6	6	6		4	4				1		
2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6				1		

ское заполнение с учетом принципа Паули (в *s*-состоянии не больше двух электронов).

5. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА

В 1896 г. голландский физик Питер Зееман наблюдал влияние магнитного поля на спектральные линии различных элементов [48]. При продольном наблюдении эффекта, когда луч света направлен вдоль магнитного поля, первоначальная линия расщепляется на две, смещенные на одинаковую частоту

$$\Delta\nu = eH/4\pi mc, \quad (5.1)$$

где e/m — отношение заряда электрона к его массе, c — скорость света и H — напряженность магнитного поля. При поперечном наблюдении эффекта, когда луч света направлен перпендикулярно направлению магнитного поля, первоначальная линия превращается в триплет — одна линия остается не смещенной, две другие появляются на тех же местах, как и в продольном эффекте. Смещенные линии дублета поляризованы по кругу в противоположных направлениях. Любопытно отметить, что первоначально Зееман ошибся в установлении направлений круговой поляризации и сделал поэтому неверное заключение, что подвижные частицы в атоме заряжены положительно. Линии триплета поляризованы линейно, причем направление колебаний электрического вектора в смещенных линиях и несмещенной взаимно перпендикулярны.

Г. А. Лорентц сразу же объяснил эффект Зеемана и на основании чисто классических соображений вывел формулу (5.1) [24, с. 89].

Рассмотрим эффект Зеемана с точки зрения квантовой теории. Объяснение основано на понятии о пространственном квантовании, изложенном выше, и на теореме Лармора [24, с. 93], которую Зоммерфельд формулирует следующим образом:

«Приложенное поле H не меняет форму орбиты, ее наклонение к направлению магнитного поля и движение по орбите, оно вызывает только равномерную прецессию орбиты вокруг направления магнитного поля с угловой скоростью

$$\Omega = eH/2mc. \quad (5.2)$$

Условие справедливости этого положения требует только, чтобы скорость электрона, связанная с прецессией, была мала по сравнению со скоростью электрона на орбите без прецессии. Это для рассматриваемой атомной модели имеет место вплоть до самых сильных магнитных полей».

Так как, согласно теореме Лармора, движение электрона по орбите в магнитном поле не меняется, то условия квантования (3.3) остаются в силе.

Пусть теперь χ — азимутальный угол в покоящейся системе, так что

$$\dot{\chi} = \dot{\psi} + \Omega, \quad \text{т. е.} \quad \chi = \psi + \Omega t, \quad (5.3)$$

если считать, что в начальный момент времени $t=0$ $\chi_0 = \psi_0$.

Кинетическая энергия электрона в отсутствие магнитного поля равна

$$T(0) = m(r^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 + r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\psi}^2) / 2. \quad (5.4)$$

Очевидно, что это же выражение определяет кинетическую энергию электрона по отношению к прецессирующей координатной системе.

Кинетическая энергия электрона в магнитном поле по отношению к неподвижной системе равна

$$\begin{aligned} T(H) &= m(r^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 + r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\chi}^2) / 2 = \\ &= m(r^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 + r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\psi}^2 + 2r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\psi} \Omega) / 2, \end{aligned} \quad (5.5)$$

где мы опустили малый член порядка Ω^2 . Так как обобщенный импульс

$$p_\psi = \partial T(0) / \partial \dot{\psi} = m r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\psi}, \quad (5.6)$$

то изменение кинетической энергии в магнитном поле равно

$$\Delta T = T(H) - T(0) = m r^2 \sin^2 \vartheta \dot{\psi} \Omega = p_\psi \Omega. \quad (5.7)$$

Учитывая (5.3), имеем

$$\int p_\psi d\psi = p_\psi 2\pi = k_1 h,$$

так что

$$\Delta T = (k_1 h / 2\pi) \Omega. \quad (5.8)$$

Так как изменение потенциальной энергии электрона в магнитном поле равно $\Delta U = 0$, то соответствующее изменение полной энергии будет

$$\Delta W = \Delta T = (k_1 h / 2\pi) \Omega. \quad (5.9)$$

Отсюда определяется сдвиг частоты $\Delta\nu$, связанный с переходом электрона из начального состояния (a) в конечное (e):

$$h \Delta\nu = \Delta W_a - \Delta W_e = (h / 2\pi) (k_{1a} - k_{1e}) \Omega. \quad (5.10)$$

Из правила отбора (2.11) вытекает, что

$$k_{1a} - k_{1e} = \pm 1 \text{ или } 0, \quad (5.11)$$

причем в первом случае смещенные линии поляризованы по кругу, а во втором, как отмечалось, линии поляризованы линейно. Комбинируя (5.10), (5.11) и (5.2), получим для смещения линий значение, равное

$$\Delta\nu = (1/2\pi)(1/2)(e/m)(H/c) = eH/4\pi mc, \quad (5.12)$$

что совпадает с (5.1).

Правила отбора (5.11) легко понять. Они получаются из-за того, что прецессионное движение является чисто периодическим с частотой $1/\nu$, т. е. не содержит кратных частот.

Интересно отметить, что из формулы (5.12) для $\Delta\nu$, выведенной на основе квантовой теории, исчезла постоянная Планка h . Как заметил Зоммерфельд, квантовые представления содержатся в (5.12) в «скрытом виде». Именно это обстоятельство позволило Лорентцу получить выражение для $\Delta\nu$, пользуясь классической моделью.

Ф. Пашен и Е. Бак, тщательно исследуя эффект Зеемана в слабых и сильных магнитных полях [1, v. II, p. 135], установили, что расщепление всегда остается пропорциональным напряженности магнитного поля H ; оно имеет различный характер для синглетов ($s=0$), дублетов ($s=1/2$), триплетов ($s=0, \pm 1$) и т. д., а также в слабых и сильных полях.

В слабых полях только синглетные термы дают нормальное расщепление Лорентца (5.1); дублеты, триплеты и т. д. приводят к более сложной картине расщепления (аномальный эффект Зеемана); при увеличении магнитного поля расщепленные линии вначале диффузно расплываются, чтобы затем, при очень сильных магнитных полях, превратиться в нормальное расщепление Лорентца — нормальный эффект Зеемана. Все эти особенности были объяснены после введения спина электрона. Однако еще до этого Альфред Ландé дал формулу (1923 г), позволяющую в точном согласии с экспериментом определить картину расщепления в сложном эффекте Зеемана. Согласно Ланде, энергетический терм W атома при наличии магнитного поля напряженности H превращается в терм $W + U$, где

$$U = hgm_j(eH/4\pi mc) \quad hgm_j\Delta\nu = \hbar\Omega m_j g. \quad (5.13)$$

Здесь $\Delta\nu$ — нормальное расщепление Зеемана (5.1), а Ω — частота Лармора (5.2), m_j — так называемое магнитное квантовое число, которое, согласно правилам пространственного квантования (3.7), принимает одно из возможных значений:

$$m_j = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j, \quad (5.13a)$$

где $j = l + s$ — внутреннее квантовое число.

Поскольку мы теперь считаем возможным значение $j=0$, имеется $2j+1$ значений m_j . Множитель Ланде имеет вид

$$g = 3/2 + [s(s+1) - l(l+1)]/2j(j+1). \quad (5.136)$$

Полагая $s=0, 1/2, 1, 3/2$; $l=0, 1, 2, \dots$, получим из формулы Ланде полную картину сложного зееман-эффекта. Для определения положения спектральных линий необходимо учесть правила отбора, согласно которым m_j может изменяться только на 0, +1 или -1.

Какие огорчения принесил аномальный эффект Зеемана физикам до открытия спина электрона, видно из высказывания Паули, которое он сделал в своей речи в Принстоне в 1946 г. [52, с. 232]: «Аномальный тип расщепления был особенно интересен тем, что хотя он и подчинялся красивым и простым законам, однако понять его было очень трудно, так как самые общие предположения об электроне, исходящие как из классической, так и из квантовой теории приводили всегда к одному и тому же триплету. При более близком знакомстве задача показалась мне еще более непреступной. Коллега, встретивший меня, когда я бесцельно бродил по прекрасным улицам Копенгагена, дружески сказал: «Вы выглядите очень несчастным». На что я пылко ответил: «Как может выглядеть человек счастливым, если он думает об аномальном эффекте Зеемана?»

Простая формула Лорентца — Зоммерфельда (5.1), (5.12) для нормального зеемановского триплета не описывает эффект Зеемана, который следует формуле Ланде (5.13). Можно поставить вопрос: если это связано с «двузначностью» электрона, не описываемой классически» (В. Паули), то нельзя ли расшифровать эту двузначность, если под $s\hbar = (1/2)\hbar$ понимать момент импульса самого электрона. Множитель Ланде (5.136) для такого электрона оказывается равным ($l=0, j=s=1/2$)

$$g = (3/2) + j(j+1)/2j(j+1) = 2, \quad (5.14)$$

но тогда, согласно (5.13),

$$U/h = m_j 2\Delta\nu, \quad (5.15)$$

где $\Delta\nu$ — зеемановское расщепление (5.1). Мы видим, что зеемановское расщепление для электрона, обладающего собственным моментом импульса $s\hbar = (1/2)(h/2\pi)$, вдвое больше, чем для оптического электрона в атоме.

Нормальное зеемановское расщепление (5.1) непосредственно следует из гиромангнитного отношения (3.8). В самом деле, если положить в нем $p = \hbar/2\pi$ и считать, что расщепление $\Delta\nu$ равно $\mu H/h$ ($-\mu H$ — энергия магнитного диполя в магнитном поле), то сразу получается формула (5.1). Для того чтобы получить вдвое большее расщепление (5.15), надо правую часть (3.8) увеличить вдвое, т. е. положить

$$\mu = 2(e/2mc)p = (e/mc)p. \quad (5.16)$$

Это «аномальное» значение гиромагнитного отношения ($2(e/2mc)$) весьма смущало физиков (в частности, Паули). Однако в 1926 г. Л. Х. Томас показал, что оно следует из теории относительности. Оно так же строго вытекает из квантовой релятивистской теории электрона Дирака. С другой стороны, полагая в (5.16) $p = h/4\pi$, мы видим, что собственный магнитный момент электрона равен магнетону Бора: $\mu_B = eh/4\pi mc$.

6. ПРИНЦИП ПАУЛИ И СПИН ЭЛЕКТРОНА

Принцип запрета, сыгравший весьма существенную роль в квантовой механике, был высказан Паули в 1925 г.

Вольфганг Паули родился 25 апреля 1900 г. в Вене в семье профессора химии Венского университета. После обучения в Венском университете Паули отправился в Мюнхенский университет для продолжения образования у Зоммерфельда. Последний заметил большие способности Паули к теоретической физике и порекомендовал ему написать подробный обзор по теории относительности для Энциклопедии математических наук, редактируемой Феликсом Клейном. Хотя Паули было только 20 лет и он был еще студентом, он блестяще справился с задачей и написанный им обзор до сих пор остается одной из лучших книг по теории относительности.

В 1922 г. Паули работал в Геттингенском университете ассистентом у М. Борна, а в 1923 г. — у Н. Бора в Институте теоретической физики в Копенгагене. Как мы увидим ниже, изучая аномальный эффект Зеемана, Паули фактически открыл спин электрона, а изучение атомных спектров привело его к формулировке принципа запрета.

В 1923—1928 гг. Паули — доцент Гамбургского университета, а в 1928—1958 гг. — профессор Политехнического института в Цюрихе. Отдельные годы этого периода он работал в Институте перспективных исследований в Принстоне. Паули обладал мощным критическим умом, поэтому выдающиеся теоретики весьма ценили общение с ним.

С 1931 г. Паули высказал гипотезу о существовании нейтрино, что позволило не отказываться от закона сохранения энергии при β -распаде. В 1940 г. он доказал теорему о связи статистики со спином, показав, что частицам с полуцелым спином соответствует статистика Ферми — Дирака.

В 1945 г. за принцип запрета Паули была присуждена Нобелевская премия по физике.

Паули умер в декабре 1958 г., когда ему не было и шестидесяти лет.

Очень интересно и ясно Паули изложил свое открытие в нобелевской лекции, прочитанной в Стокгольме 13 декабря 1946 г. [52, с. 357]. В дальнейшем мы будем близко придерживаться этой лекции.

Важную роль в открытии принципа запрета сыграли исследования Бора распределения электронов в подгруппах у атомов в периодической системе элементов. Хотя Бор еще не понимал, что в состояниях n_1 (т. е. s -состояниях) не может быть больше двух электронов, он справедливо считал непонятным, почему все электроны атома не сосредотачиваются в наиниžшем энергетическом со-

стоянии в K -оболочке. Невозможно было также найти объяснение тому, почему не комбинируют в спектре гелия термы ортогелия и парагелия.

В разделе 4 мы уже отмечали, что Зоммерфельд для объяснения спектров щелочных металлов ввел внутреннее квантовое число $j=l+s$, где l — орбитальное квантовое число оптического электрона, а величина $s\hbar=(1/2)\hbar$ характеризует момент импульса атомного остова. Паули показал, что эта интерпретация s не может быть верной и приписал квантовое число s самому оптическому электрону. Таким образом, электрон характеризовался теперь четырьмя квантовыми числами: $n, l, j=l+s, m_j$, где n — главное квантовое число, l — орбитальное и $m_j = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j$ — магнитное, принимающее $2j+1$ значений.

В своей нобелевской лекции Паули пишет [52, с. 359]:

«... появилась работа английского физика Стонера, содержащая наряду с улучшением классификации электронов в подгруппах следующее существенное замечание: при заданной величине главного квантового числа число энергетических уровней отдельного электрона в спектрах щелочных металлов во внешнем магнитном поле равно числу электронов в замкнутой оболочке инертных газов, соответствующей этому главному квантовому числу. Тогда на основе моих прежних результатов по классификации спектральных термов в сильном магнитном поле для меня проявилась общая формулировка принципа запрета. Основную мысль можно высказать так: сложные числа электронов в замкнутых подоболочках сводятся к простому числу 1, если классификация оболочки проводится с помощью значений 4-х квантовых чисел при условии, что снимается всякое вырождение (другими словами, если каждое состояние характеризуется 4-мя квантовыми числами, то оно занято одним электроном — А. А.). Вообще невырожденный уровень является уже «заполненным», если он занят одним-единственным электроном; состояния, противоречащие этому постулату, запрещаются».

Эта общая формулировка принципа запрета была опубликована в Гамбурге весной 1925 г., после того как во время посещения Тюбингена мне удалось подтвердить с помощью имевшихся там спектроскопических данных некоторые дополнительные следствия относительно аномального эффекта Зеемана в более сложных атомах. Физики, кроме специалистов по классификации спектральных термов, считали принцип запрета малопонятным, поскольку четвертая степень свободы электрона не описывалась никакой моделью».

Свойство электрона самому обладать моментом импульса, равным $(1/2)\hbar$, и магнитным моментом, равным магнетону Бора, получило некоторую наглядную, хотя и неверную интерпретацию в работе молодых голландских физиков Г. Е. Уленбека и С. Гаудсмита [53], связавших это свойство с вращением электрона вокруг собственной оси. Предполагая, что заряд электрона равномерно распределен по его поверхности, они действительно пока-

зали, что отношение его магнитного момента к моменту импульса вдвое больше, чем для орбитального движения (см. (5.16)). Следует, однако, отметить, что такое наглядное истолкование спина оказалось несостоятельным, поскольку периферическая скорость у электрона оказалась много больше скорости света. Поэтому утверждение Паули: «... мои прежние сомнения, а также осторожное выражение «двузначность электрона, не поддающаяся классическому описанию», в дальнейшем получили известное подтверждение, так как Бор показал с помощью волновой механики, что спин электрона (имеется в виду — свободного электрона — А. А.) нельзя измерить в классически описываемых опытах, и поэтому спин следует рассматривать как существенно квантово-механическое свойство электрона».

Хотя модель вращающегося электрона Уленбека и Гаудсмита оказалась несостоятельной для объяснения спина электрона, их работа сыграла большую пропагандистскую роль в признании этой идеи. Подлинное теоретическое доказательство существования спина у электрона было получено из квантово-релятивистского уравнения Дирака для электрона (1928 г.).

ПОПЫТКИ ОБОСНОВАНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ БОРА — ЗОММЕРФЕЛЬДА

В период с 1913 по 1925 гг., предшествующий созданию современной квантовой механики (Гейзенберг, Шредингер, Дирак), были сделаны попытки обоснования квантовой механики Бора—Зоммерфельда. К их числу относятся принцип соответствия и теория адиабатических инвариантов. Сам Бор придавал большое значение принципу соответствия, пронциательно предвидя в нем квазиклассическое приближение волновой механики Шредингера.

Мы очень кратко остановимся на этих вопросах.

1. ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ

При изложении принципа соответствия я придерживаюсь доклада Н. Бора, прочитанного им 27 апреля 1920 г. на заседании Немецкого физического общества в Берлине см. [43, т. I, с. 247]. Выпишем формулу (5.1.8) для $Z=1$:

$$\nu = R(1/n_1^2 - 1/n_2^2), \quad (1.1)$$

где постоянная Ридберга равна

$$R = 2\pi^2 m e^4 / h^3. \quad (1.2)$$

Рассмотрим случай, когда n_1 и n_2 велики, но близки друг другу. Тогда соотношение (1.1) может быть записано в виде

$$\nu = R(n_2 - n_1)(n_1 + n_2) / n_1^2 n_2^2 \approx R(n_2 - n_1)(2/n^3), \quad (1.3)$$

где $n \approx n_1 \approx n_2$. Здесь ν — частота излучаемого света, равная частоте обращения электрона по орбите в (5.1.1). Для ясности дальнейших рассуждений мы обозначим теперь частоту обращения электрона в (5.1.1) через ω .

Из (1.1) следует, что энергетические термы атома водорода равны

$$E = -R h / n^2. \quad (1.4)$$

Подставляя $|E|$ из (1.4) в (5.1.1) и обозначая ν через ω , получим

$$\omega = (1/n^3) (2h^3 R^3 / \pi^2 m e^4)^{1/2}. \quad (1.5)$$

Если подставить теперь отсюда $1/n^3$ в (1.3), то получим

$$\nu \approx (n_2 - n_1) \omega (2\pi^2 m e^4 / R^3 h^3)^{1/2}. \quad (1.6)$$

Так как $(n_2 - n_1)$ — целое число, то $(n_2 - n_1) \omega$ совпадает с частотой

той одной из гармонических компонент, на которые может быть разложено периодическое движение электрона. В самом деле, для всякого периодического движения частоты ω , смещение ξ частицы системы может быть представлено тригонометрическим рядом:

$$\xi = \sum_{\tau} C_{\tau} \cos 2\pi(\tau\omega t + a_{\tau}), \quad (1.7)$$

где τ принимает все положительные целые значения.

Для того чтобы ν совпадало в (1.6) с частотами, кратными ω , надо, чтобы корень в (1.6) равнялся единице, а это приводит для постоянной Ридберга к выражению (1.2).

Таким образом, для больших квантовых чисел частота излучаемого по квантовой теории света совпадает с той, которую дает классическая теория. В этом и заключается простейшее следствие принципа соответствия.

Далее Бор делает предположение, что квантовая теория для больших квантовых чисел приводит к совпадению с классической теорией не только частот излучаемого света, но и относительных интенсивностей линий излучения. Он распространил это утверждение и на интенсивность линий, соответствующих малым квантовым числам, и при этом получил весьма обнадеживающие результаты.

В конце раздела 2 гл. V мы отметили, что Бор, используя принцип соответствия, получил правила отбора для азимутального квантового числа k (5.2.11).

В примечании к своей статье А. Рубинович указывает, что, когда работа была готова для печати, появилась первая часть статьи Бора [1, в. II, р. 13], в которой он, используя совсем другие аргументы, приходит к тому же результату. Бор считает, что если амплитуда разложения в ряд Фурье для некоторой частоты равна нулю, то интенсивность линии соответствующей частоты, определяемой квантовыми условиями, тоже равна нулю. В самом деле, триплет Лорентца (5.5.1) свидетельствует о том, что соответствующее периодическое движение происходит с угловой скоростью (5.5.2) и не имеет обертонов, отсюда и следуют правила отбора (5.5.11).

Исследуя характер классического движения путем разложения в ряд Фурье, можно, используя принцип соответствия, определить и поляризацию соответствующих спектральных линий.

2. ТЕОРИЯ АДИАБАТИЧЕСКИХ ИНВАРИАНТОВ

Правила квантования систем с одной и двумя степенями свободы (гл. I, раздел 1, гл. V, раздел 2) получили некоторое обоснование в теории адиабатических инвариантов. Толчком к развитию этих представлений в связи с квантовой теорией послужил вопрос, поставленный Г. Лорентцем на Первом Сольвеевском конгрессе (1911 г.).

Лорентц спросил, как будет вести себя математический маятник (осциллятор) с энергией $\epsilon = nh\nu$, если укорачивать длину l

его нити, когда увеличивается его частота

$$v = (1/2\pi) (g/l)^{1/2}, \quad (2.1)$$

где g — ускорение свободного падения.

Эйнштейн сразу же дал на этот вопрос правильный ответ. Он указал на то, что если нить будет укорачиваться бесконечно медленно (адиабатически), то будет возрастать не только частота маятника, но и его энергия, так что соотношение $\epsilon = nh\nu$ сохранится*). П. Эренфест развил соображения Эйнштейна и построил теорию адиабатических инвариантов применительно к квантовой теории. Вначале Эренфест рассмотрел вопрос в связи с законом смещения Вина для черного излучения. Он отметил странное обстоятельство, что закон смещения Вина, выведенный из чисто классических соображений, справедлив в области высоких частот, когда излучение заведомо подчиняется законам не классической, а квантовой теории.

Можно показать, что если любое излучение помещено в замкнутую полость с зеркально отражающими стенками и если бесконечно медленно (адиабатически) сдвигать стенки полости, то для некоторой s -й моды колебаний отношение ее энергии к частоте, т. е. ϵ_s/ν_s , остается постоянным. Таким образом, это отношение можно положить равным целому кратному постоянной Планка h ; так что $\epsilon_s = nh\nu_s$, это эквивалентно гипотезе Планка для черного излучения.

Затем Эренфест перешел к рассмотрению механических систем с одной и несколькими степенями свободы и сделал ряд обобщений.

Рассмотрим вначале математический маятник, придерживаясь книги Зоммерфельда [48]. Натяжение нити маятника равно

$$\bar{F} = mg \cos \varphi + ml\dot{\varphi}^2,$$

где m — масса маятника и φ — угол отклонения нити от вертикали. Первое слагаемое — составляющая силы тяжести вдоль нити, второе — центробежная сила. Если укорачивать нить на $|dl|$ адиабатически медленно, т. е. так, что за это время маятник совершит много колебаний, то работа, совершенная над маятником, равна

$$dA = \bar{F} |dl| = -mg \overline{\cos \varphi} dl - ml\overline{\dot{\varphi}^2} dl. \quad (2.2)$$

Здесь $dl < 0$ (укорочение), поэтому $dA > 0$. Так как

$$\varphi = c \sin(2\pi\nu t + \gamma),$$

где c — угловая амплитуда маятника, а угол отклонения φ мал,

*) По-видимому, Эйнштейн не знал работы Рэлея (1902 г.), который показал, что при бесконечно медленном изменении длины маятника отношение энергии к частоте (ϵ/ν) остается постоянным.

то найдем

$$\begin{aligned}\cos \varphi &= 1 - (1/2) \overline{\varphi^2} = 1 - (1/4) c^2, \\ \overline{\varphi^2} &= (2\pi\nu)^2 c^2 / 4 = (1/2) (g/l) c^2,\end{aligned}\quad (2.3)$$

где мы во втором равенстве использовали (2.1). Подставляя (2.3) в (2.2), получим

$$dA = -mg \, dl - (1/4) mg c^2 dl.$$

Здесь первое слагаемое связано с поднятием массы m в поле силы тяжести, второе — с изменением энергии маятника, связанной с колебаниями. Можно показать, что второе слагаемое будет вдвое больше изменения средней кинетической энергии, равной

$$\overline{T} = (1/2) m l^2 \overline{\dot{\varphi}^2} = (1/4) m g l c^2, \quad (2.4)$$

где было использовано (2.3). Таким образом,

$$-(1/4) m g c^2 dl = 2d(1/4) m g l c^2.$$

Откуда

$$-(3/4) c \, dl = l \, dc,$$

что после интегрирования дает

$$l^{3/4} c = \text{const.}$$

Возведя это равенство в квадрат и заменяя после этого lc^2 из (2.4) и $l^{1/2}$ из (2.1), видим, что предыдущее равенство может быть записано в виде

$$2\overline{T}/\nu = E/\nu = \text{const}, \quad (2.5)$$

где мы воспользовались тем, что при гармоническом колебательном движении средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной. Постоянная (2.5) называется адиабатическим инвариантом. Мы видим (во всяком случае, в нашем частном случае), что адиабатические инварианты являются постоянными величинами, которые можно положить равными целому числу, кратному постоянной Планка h ; в самом деле, если $E/\nu = nh$, то $E = nh\nu$, что совпадает с условием Планка для гармонического осциллятора (1.1.20).

Покажем, что адиабатический инвариант (2.5) совпадает с интегралом действия за период τ ; интеграл действия имеет вид

$$J = \int_0^\tau p \dot{q} \, dt = \oint p \, dq.$$

В случае маятника $q = \varphi$, $p = \partial T / \partial \dot{\varphi} = ml^2 \dot{\varphi}$, поэтому интеграл действия равен

$$J = \int_0^\tau p \dot{q} \, dt = \int_0^\tau ml^2 \dot{\varphi}^2 \, dt = 2 \int_0^\tau T \, dt = 2\tau \frac{1}{\tau} \int_0^\tau T \, dt = 2\frac{\overline{T}}{\nu}, \quad (2.6)$$

так как период $\tau = 1/\nu$. Мы видим, что интеграл действия J есть адиабатический инвариант.

Рассмотрим адиабатические инварианты системы с двумя степенями свободы. В качестве такой системы выберем частицу массы m , движущуюся по эллипсу около гравитационного центра под действием центральной силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния [1, в. II, р. 123]. Такое эллиптическое движение описывается формулами (5.1.1). Положим $Ze^2 = m\mu$, где μ — некоторая силовая константа; в случае гравитационного притяжения $\mu = GM$, где M — масса центрального тела, G — гравитационная постоянная.

Подставляя в (5.1.1) $|E|$ из второго выражения в первое, получим для периода обращения значение, равное

$$\tau = 1/v = 2\pi a^{3/2} \mu^{-1/2}. \quad (2.7)$$

Мы видим, что квадрат времени обращения пропорционален кубу большой полуоси эллипса (закон Кеплера).

Из теоремы вириала [44, с. 36] в случае сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния, следует, что средняя кинетическая энергия равна половине среднего значения потенциальной энергии, взятой с обратным знаком. В то же время $\overline{m\dot{r}}/2r = m\mu/2a$, так как можно показать, что среднее по времени от $1/r$ равно $1/a$, где a — большая полуось эллипса. Тогда интеграл действия равен

$$2 \int_0^\tau \frac{mv^2}{2} dt = \tau \overline{mv^2} = \tau \left(\frac{m\dot{r}}{r} \right) = 2\pi a^{3/2} \mu^{-1/2} \frac{m\mu}{a} = 2\pi m \mu^{1/2} a^{1/2}, \quad (2.8)$$

где мы воспользовались теоремой вириала и (2.7).

Квадрат скорости частицы при эллиптическом движении равен [54, § 49]

$$v^2 = \mu (2/r - 1/a). \quad (2.9)$$

Если умножить обе части равенства на m и усреднить по времени, то получим

$$\overline{mv^2} = \overline{2m\dot{r}} - m\mu/a = m\mu/a,$$

в согласии с теоремой вириала (конечно, (2.9) справедливо не только в среднем, но и точно).

Будем теперь адиабатически медленно менять m , μ и v ; это может, например, происходить в результате поглощения космической пыли массами планеты m и центрального тела M . Из (2.9) получим

$$\delta(2 \lg v) = \delta(\lg \mu) + \delta(\lg (2/r - 1/a)),$$

или

$$2(\delta v/v) = \delta\mu/\mu + \mu\delta a/a^2 v^2, \quad (2.10)$$

где мы заменили $2/r - 1/a$ из (2.9). Если тело m поглощает массу δm , первоначально находившуюся в покое, то $\delta(m\dot{v}) = 0$ и, сле-

довательно, $\delta v/v = \delta m/m$; тогда из (2.10) вытекает, что

$$\delta a/a^2 = -(v^2/\mu) (2\delta m/m + \delta\mu/\mu). \quad (2.11)$$

Если адиабатическое изменение происходит настолько медленно, что частица успевает сделать много оборотов вокруг силового центра, то уравнение (2.11) надо интегрировать после усреднения v^2 . Мы знаем, что $\bar{v}^2 = \mu/a$, поэтому

$$\delta a/a + 2\delta m/m + \delta\mu/\mu = 0,$$

или

$$\delta [\lg(m^2\mu a)] = 0.$$

Отсюда следует, что адиабатический инвариант равен

$$m^2\mu a = \text{const}. \quad (2.12)$$

Мы видим, что его постоянство совпадает с условием постоянства интеграла действия (2.8).

При кеплеровском движении действие

$$\int m (\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) dt \quad (2.13)$$

есть сумма двух интегралов, именно $\int m \dot{r} dr$ и $\int m r^2 \dot{\varphi} d\varphi$; поскольку изменение μ и m не влияет на момент импульса*), то второй интеграл должен быть адиабатическим инвариантом. Но так как их сумма, равная полному действию, тоже адиабатический инвариант, то и первый интеграл — адиабатический инвариант. Мы приходим, таким образом, к оправданию правила квантования (5.2.5), предложенного Зоммерфельдом.

*) Изменение μ и m создает некоторую дополнительную силу в направлении радиус-вектора, момент которой равен нулю.

ВОЛНЫ МАТЕРИИ И КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ

В сентябре 1923 г. французский физик Луи де Бройль опубликовал работу [55], в которой он высказал странную, на первый взгляд, идею, — что частицы с массой покоя, отличной от нуля (например, электроны), аналогично квантам света (фотонам), обладают не только корпускулярными, но и волновыми свойствами.

Свою идею он обосновал следующим образом. Он приписал покоящейся в системе K частице массой m_0 некоторый колебательный в пространстве процесс вида

$$\psi = A \sin 2\pi\nu_0 t, \quad (1.1)$$

где $h\nu_0 = m_0c^2$. Здесь ν_0 — частота этого колебательного процесса, h — постоянная Планка и c — скорость света в вакууме.

Как будет воспринимать этот колебательный процесс наблюдатель в системе K' , относительно которого частица движется вдоль оси $-x'$ с постоянной скоростью v ? Согласно специальному принципу относительности (2.2.4а), время будет равно

$$t = \frac{t' + vx'/c^2}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}. \quad (1.2)$$

Следовательно, наблюдатель, относительно которого частица движется, будет воспринимать ее как волну

$$\psi' = A' \sin 2\pi\nu(t' + x'/u) \quad (1.3)$$

частоты

$$\nu = \frac{\nu_0}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}}, \quad (1.4)$$

имеющую фазовую скорость

$$u = c^2/v. \quad (1.4a)$$

То обстоятельство, что фазовая скорость u больше скорости света c , не противоречит специальному принципу относительности, так как с u не передается какой-либо сигнал.

Вычислим длину дебройлевской волны:

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{(c^2/v)(1 - v^2/c^2)^{1/2}}{\nu_0} = \frac{h}{m_0v(1 - v^2/c^2)^{-1/2}} = \frac{h}{p}, \quad (1.5)$$

где релятивистский импульс

$$p = m_0 v (1 - v^2/c^2)^{-1/2}. \quad (1.5a)$$

Соотношение (1.5) релятивистски-инвариантно, хотя полная релятивистски-инвариантная теория движения электрона во внешнем поле была создана английским теоретиком П. Дираком только в 1928 г. Заметим также, что энергия частицы $m_0 c^2 (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, согласно (1.1) и (1.4), равна $h\nu$, в соответствии с основным соотношением квантовой теории.

Таким образом, каждой движущейся частице мы можем сопоставить волну с длиной, равной h/p (1.5). Это выражение аналогично тому, которое имеет место для фотонов, так как для них

$$\lambda = c/\nu = h (h\nu/c)^{-1}, \quad (1.6)$$

где $h\nu/c$ — импульс фотона.

Покажем теперь, что скорость частицы v совпадает с групповой скоростью волн де Бройля. По определению групповой скорости [56, § 7]

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\nu/dv}{d(1/\lambda)/dv} = v, \quad (1.7)$$

где мы для вычисления производных по v воспользовались (1.4) и (1.5).

Де Бройль смог также дать некоторое примитивное объяснение правилу квантования электрона в атоме водорода (Бор, 1913 г.).

Потребуем, чтобы длина волны электрона (1.5) укладывалась целое число раз вдоль круговой орбиты электрона радиуса r :

$$2\pi r = n\lambda, \quad (1.8)$$

где n — целое число. Используя (1.5), получим, что момент импульса электрона равен

$$M = pr = n (h/2\pi). \quad (1.9)$$

Условие (1.9) совпадает с (5.1.11). Я назвал это объяснение примитивным, так как, строго говоря, соображения де Бройля относились к электрону, движущемуся по инерции с постоянной по модулю и направлению скорости v . Я вспоминаю, как в 1924 г. физики со смехом говорили, что, согласно объяснению де Бройля, электрон на боровской орбите «сам себя ловит за хвост».

Вскоре де Бройль [57] высказал глубокое суждение о том, что новая механика относится к старой классической так, как волновая оптика к геометрической.

Для частоты волн ν в электрическом поле с потенциалом ϕ де Бройль пишет соотношение

$$h\nu = m_0 c^2 / (1 - v^2/c^2)^{1/2} + e\phi, \quad (1.10)$$

где e — заряд частицы. Отсюда уже один шаг до установления

волнового уравнения для частицы в произвольном силовом поле. Однако этот решительный шаг был сделан австрийским физиком Э. Шредингером (1926 г.) уже после создания В. Гейзенбергом матричной квантовой механики.

Экспериментальное доказательство существования волн де Бройля не заставило себя долго ждать. Уже в 1925 г. геттингенский физик В. Эльзассер, побуждаемый дискуссиями с Дж. Франком, высказал предположение, что эффект Рамзауэра*) обусловлен дифракцией медленных электронов в поле атома и что кривые углового рассеяния электронов поверхностью металлов, наблюдавшиеся в лаборатории «Белл-телефон» в Нью-Йорке К. Дж. Дэвиссоном и К. Г. Кунсманом в 1925 г., тоже свидетельствуют о волновой природе электронов.

Более точные количественные результаты были получены К. Дж. Дэвиссоном и Л. Г. Джермером на монокристаллах никеля [58]. Они полностью воспроизвели картину дифракции, соответствующую решетке никеля, и подтвердили соотношение де Бройля (1.5). В том же 1927 г. сын выдающегося физика Дж. Дж. Томсона Дж. П. Томсон наблюдал интерференцию быстрых электронов при прохождении их сквозь тонкие металлические фольги. За эту работу К. Дж. Дэвиссону и Дж. П. Томсону в 1937 г. была присуждена Нобелевская премия.

Соотношение де Бройля (1.5) было подтверждено не только для электронов, но и для молекулярных пучков. О. Штерн наблюдал в 1929 г. интерференцию водородного пучка при рассеянии на кристалле каменной соли. Впоследствии И. Эстерман и О. Штерн добились превосходных результатов, исследуя рассеяние гелиевого и водородного пучков кристаллами LiF (хорошее изложение см. в [59, с. 137]).

2. ПРИМЕНЕНИЕ СТАТИСТИКИ БОЗЕ К ФОТОНАМ

В том же 1924 г. индийский физик Ш. Бозе из университета в Дакке (Восточный Пакистан**) опубликовал важную работу, которая послужила основой квантовой статистики бесспиновых частиц. Бозе прислал свою работу Эйнштейну, который перевел ее на немецкий язык и направил 2 июля 1924 г. в печать [60] (рус. пер. [15, т. III, с. 475]). Статья Бозе называлась «Закон Планка и гипотеза световых квантов». Она была посвящена выводу распределения Планка на основе некоторой новой статистики световых квантов (фотонов).

Бозе подвергает критике существующие выводы распределения Планка. Он указывает, что вывод самого Планка основан на выражении (1.1.2), связывающем плотность излучения ρ_ν со средней энергией осциллятора $u(\nu, T)$, находящейся в равновесии с из-

*) Эффектом Рамзауэра называется наблюдаемое на опыте увеличение пропускания атомов для медленных электронов.

**) С 1971 г. — Народная Республика Бангладеш. (Примеч. ред.)

лучением. Однако множитель $8\pi\nu^2 d\nu/c^3$ в правой части (1.1.2) основан на классических представлениях об электромагнитных волнах, находящихся в полном противоречии с развиваемыми далее квантовыми представлениями.

Хотя вывод распределения Планка, данный Эйнштейном (гл. I, раздел 3), во многих отношениях более удовлетворителен, он тоже, по мнению Бозе, логически непоследователен, так как в нем используется закон Вина, основанный на классических представлениях, и принцип соответствия.

Далее Бозе излагает свой вывод распределения Планка. Пусть равновесное излучение общей энергии E заключено в объеме V , тогда

$$E = \sum_s N_s h\nu_s = V \int \rho_\nu d\nu. \quad (2.1)$$

Здесь N_s — число световых квантов (фотонов) с частотой $(\nu_s, \nu_s + d\nu_s)$. Требуется определить число равновесных фотонов N_s , непосредственно связанных с ρ_ν . Если мы определим вероятность состояния с произвольными фотонами N_s , удовлетворяющими (2.1), а затем определим максимум этой вероятности, то задача будет решена. Мы можем определить термодинамическую вероятность, связанную с энтропией системы, а затем определить максимум энтропий, соответствующей равновесному состоянию [2 с. 100].

Так как фотон обладает импульсом $p = h\nu/c$, то объем фазового пространства (т. е. произведение V на объем пространства импульсов слоя $(p, p + dp)$) равен

$$V 4\pi p^2 dp = 4\pi V (h^3 \nu^2 / c^3) d\nu. \quad (2.2)$$

Число ячеек объема h^3 в этом фазовом объеме равно $4\pi V \nu^2 d\nu / c^3$, а общее число состояний с учетом поляризации фотона в два раза больше, т. е. равно

$$A_s = 8\pi V (\nu^2 / c^3) d\nu. \quad (2.3)$$

Каким числом способов N_s фотонов могут быть размещены по A_s состояниям? Обозначим из общего числа A_s состояний через $p_0^s, p_1^s, p_2^s, \dots$ число пустых состояний (с нулем фотонов), с одним фотоном, с двумя фотонами и т. д. Очевидно, что

$$N_s = 0p_0^s + 1p_1^s + 2p_2^s + \dots = \sum_{r=0}^{\infty} r p_r^s, \quad (2.4)$$

$$A_s = p_0^s + p_1^s + p_2^s + \dots = \sum_{r=0}^{\infty} p_r^s. \quad (2.5)$$

Если мы будем считать фотоны неразличимыми, т. е. не будем считать разными состояния, получившиеся при обмене «местами»

двух фотонов, то искомое число способов равно *)

$$A_s! / p_0^s! p_1^s! p_2^s! \dots \quad (2.6)$$

Полное число способов размещения всех фотонов по всем слоям dv_s , т. е. термодинамическая вероятность определенного макроскопического состояния фотонного газа, равно

$$W = \prod_s (A_s! / p_0^s! p_1^s! p_2^s! \dots) = \prod_s \left(A_s! / \prod_i p_i^s! \right). \quad (2.7)$$

Равновесному состоянию системы фотонов соответствует максимум энтропии:

$$S = k \lg W = k \left(\sum_s A_s \lg A_s - \sum_s \sum_r p_r^s \lg p_r^s \right), \quad (2.8)$$

где мы воспользовались формулой Стирлинга ($\ln n! = n \lg n - n$) и учли (2.5). Так как A_s имеют постоянные значения, то максимуму S соответствует условие

$$\delta S = -k \sum_s \sum_r \delta p_r^s (1 + \lg p_r^s) = 0. \quad (2.9)$$

Однако величины p_r^s не независимы; согласно (2.1), (2.4) и (2.5),

$$\sum_s \hbar \nu_s \delta N_s = 0, \quad \delta N_s = \sum_r r \delta p_r^s, \quad \sum_r \delta p_r^s = 0,$$

т. е.

$$\sum_s \sum_r \hbar \nu_s r \delta p_r^s = 0, \quad (2.10)$$

$$\sum_r \delta p_r^s = 0. \quad (2.11)$$

Для того чтобы учесть дополнительные условия (2.10) и (2.11), которым должны удовлетворять δp_r^s , можно воспользоваться методом неопределенных множителей Лагранжа; тогда, вместо (2.9), получим

$$\sum_s \sum_r \delta p_r^s (1 + \lg p_r^s + \lambda_s + r \hbar \nu_s / \beta) = 0, \quad (2.12)$$

где λ_s и $1/\beta$ — множители Лагранжа. Теперь можно все δp_r^s считать независимыми, поэтому

$$1 + \lg p_r^s + \lambda_s + r \hbar \nu_s / \beta = 0, \quad (2.13)$$

откуда

$$p_r^s = B_s e^{-r \hbar \nu_s / \beta} \quad (B_s \equiv e^{-1 - \lambda_s}). \quad (2.14)$$

*) Число способов размещения N_s неразличимых объектов по A_s состояниям может быть записано в виде $(N_s + A_s - 1)! / N_s! (A_s - 1)!$, т. е. без использования вспомогательных величин p_r^s . В этом случае весь вывод распределения Планка проще (см. [2, с. 419]).

Из последнего выражения и из (2.5) следует, что

$$A_s = B_s \sum_r e^{-r h \nu_s / \beta} = B_s (1 - e^{-h \nu_s / \beta})^{-1},$$

$$B_s = A_s (1 - e^{-h \nu_s / \beta}).$$
(2.15)

Из (2.4), (2.14) и (2.15) получим число фотонов, равное

$$N_s = \sum_r r p_r^s = A_s (1 - e^{-h \nu_s / \beta}) \sum_r r e^{-r h \nu_s / \beta} =$$

$$= A_s (1 - e^{-h \nu_s / \beta}) \left[-\frac{\partial}{\partial (h \nu_s / \beta)} \sum_r e^{-r h \nu_s / \beta} \right] = \frac{A_s e^{-h \nu_s / \beta}}{1 - e^{-h \nu_s / \beta}}. \quad (2.16)$$

Мы видим, что N_s непосредственно выражается через A_s ; вспомогательные величины p_r^s выпали. Из (2.1) и (2.3) найдем, что энергия равна

$$E = \sum_s N_s h \nu_s = \sum_s (8 \pi h \nu_s^3 d \nu_s / c^3) V [e^{-h \nu_s / \beta} / (1 - e^{-h \nu_s / \beta})]. \quad (2.17)$$

Используя полученные выше результаты, можно показать, что энтропия равна

$$S = k \left[(E / \beta) - \sum_s A_s \lg (1 - e^{-h \nu_s / \beta}) \right]. \quad (2.18)$$

Отсюда вытекает, что *)

$$\partial S / \partial E = k / \beta. \quad (2.19)$$

Но из термодинамики известно, что $\partial S / \partial E = 1 / T$, поэтому

$$\beta = k T. \quad (2.20)$$

Таким образом, (2.17) приобретает вид

$$E = \sum_s (8 \pi V h \nu_s^3 / c^3) [1 / (e^{h \nu_s / k T} - 1)] d \nu_s, \quad (2.21)$$

что совпадает с распределением Планка.

В конце статьи указано, что перевод выполнен Эйнштейном и добавлено следующее примечание переводчика: «Вывод формулы Планка, предложенный Бозе, является, по моему мнению, большим достижением. Использованный им метод дает также квантовую теорию идеального газа, которую я изложу в другом месте».

3. ИДЕАЛЬНЫЙ ГАЗ ПО СТАТИСТИКЕ БОЗЕ — ЭЙНШТЕЙНА

А. Эйнштейн распространил статистический метод Бозе на идеальный газ частиц с массами покоя, отличными от нуля. Статья Эйнштейна «Квантовая теория одноатомного идеального газа» по-

*) Здесь проще сказать, что условия равновесия следуют из максимума функции $S/k - E/\beta$, где $1/\beta$ — множитель Лагранжа, и слагаемое E/β учитывает постоянство энергии системы; тогда $d(S/k - E/\beta) = 0$ или $\partial S / \partial E = k/\beta$.

явилась в виде двух сообщений в журнале [61] (рус. пер. [15, т. III, с. 481, 489]). Для определения функции распределения и уравнения состояния Эйнштейн пользуется тем же методом, что и Бозе, поэтому мы не будем последовательно излагать его работу и отметим только некоторые новые точки зрения и результаты.

В случае идеального газа из материальных частиц надо наряду с полной кинетической энергией системы $E = \Sigma(1/2)mv^2$ (m — масса частицы, p — ее импульс; суммирование ведется по всем частицам газа), аналогичной (2.1), задать и полное число частиц n . Тогда в выражении, аналогичном (2.12), наряду с множителем Лагранжа β появится второй множитель Лагранжа A . Можно показать, что по-прежнему $\beta = kT$, а $A = -\mu/kT$, где μ — химический потенциал газа (Эйнштейн на это явно не указывает).

Среднее число частиц в ячейке объема h^3 с энергией $\epsilon_p = (1/2m)p^2$ получается равным

$$n_p = 1/(e^{A+\beta\epsilon_p} - 1) = 1/(e^{(\epsilon_p - \mu)/kT} - 1). \quad (3.1)$$

Это выражение при химическом потенциале $\mu = 0$ совпадает с тем, которое было получено Бозе для квантов света. Если $\exp A = \exp(-\mu/kT) \gg 1$ и можно пренебречь в знаменателе (3.1) единицей, то распределение (3.1) переходит в распределение Максвелла—Больцмана

$$n_p = e^{(\mu - \epsilon_p)/kT}. \quad (3.2)$$

Эйнштейн вводит параметр $\lambda = \exp(-A) = \exp(\mu/kT)$, который он называет мерой вырождения газа. Слабому вырождению, когда в знаменателе (3.1) можно пренебречь единицей, соответствует $\lambda \ll 1$, при этом химический потенциал μ имеет большое отрицательное значение. Для того чтобы при всех значениях ϵ_p числа n_p были положительными, необходимо, чтобы $\lambda \leq 1$.

В случае $\lambda \ll 1$, когда распределение подчиняется классическому закону (3.2), параметр λ может быть определен через полное число частиц n :

$$\sum_p n_p = \lambda \int_0^\infty e^{-p^2/2mkT} \frac{4\pi p^2 V}{h^3} dp = \lambda (2\pi mkT)^{3/2} \frac{V}{h^3} = n,$$

откуда

$$\lambda = (n/V) h^3 / (2\pi mkT)^{3/2}. \quad (3.3)$$

Хотя это значение λ получено в случае $\lambda \ll 1$, однако можно сделать следующее качественное заключение: относительно большим λ (для $\lambda \leq 1$), т. е. вырождению, будут способствовать высокие концентрации n/V , малые массы частиц m и низкие температуры T . Однако ни для одного из газов наблюдать это вырождение нельзя, так как при соответствующих концентрациях и температурах отступление газа от идеального, связанное с взаимодействием молекул, всегда значительно больше.

Для давления газа, подчиняющегося новой статистике, Эйнштейн получает

$$P = (2/3) E/V,$$

где V — объем, занимаемый газом, E — его кинетическая энергия. По поводу этой формулы Эйнштейн пишет: «Таким образом, получается замечательный результат: соотношение между кинетической энергией и давлением оказывается точно таким же, как в классической теории, где оно выводится с помощью теоремы вириала».

Во втором своем сообщении Эйнштейн описывает новый интересный эффект. Из развитой им теории следует, что при заданной температуре концентрация частиц идеального газа не может превышать некоторого предельного значения, соответствующего $\lambda = 1$. Далее Эйнштейн спрашивает:

«Но что будет происходить, если при этой температуре увеличивать (например, путем изотермического сжатия) плотность вещества n/V ? Я утверждаю, что в этом случае некоторое число молекул, все возрастающее с общей плотностью, переходит в 1-е квантовое состояние (с нулевой кинетической энергией), тогда как остальные молекулы распределяются соответственно параметру $\lambda = 1$ (т. е. пребывают в состоянии с положительной кинетической энергией — А. А.).

Следовательно, это утверждение состоит в том, что происходит нечто аналогичное изотермическому сжатию пара в объеме, соответствующем насыщению. Наступает разделение: одна часть «конденсируется», а оставшаяся образует «насыщенный идеальный газ» (с $\lambda = 1$).

Явление это обычно называют «бозе-эйнштейновской конденсацией» (хотя оно было открыто Эйнштейном); оно играет важную роль в явлении сверхтекучести жидкого гелия.

Эйнштейн указывает также, что в основе новой статистики лежит принцип неразличимости (квантовой тождественности) одинаковых частиц. Он называет принцип различимости частиц, используемый при подсчете термодинамической вероятности в классической статистике, «гипотезой о взаимной статистической независимости молекул газа».

Далее Эйнштейн вычисляет флуктуации числа частиц газа заданной энергии ΔE и получает двучленную формулу, совершенно аналогичную той, которую он вывел для флуктуаций энергии фотонов черного излучения (1.3.2).

И в случае бозе-эйнштейновского газа одно слагаемое в выражении для флуктуаций носит корпускулярный характер, второе — волновой. Эйнштейн сопоставляет второму слагаемому скалярное поле дебройлевских волн частиц газа. Он указывает, что прямое вычисление интерференции этих волн дает второе слагаемое в выражении для флуктуаций.

В заключение Эйнштейн пытался приложить открытую им статистику к свободным электронам в металле, что, очевидно, не могло иметь успеха.

4. СТАТИСТИКА ФЕРМИ

Полтора года спустя после появления работ Бозе и Эйнштейна по квантовой статистике появилась статья молодого итальянского физика Энрико Ферми [62], посвященная квантовой статистике идеального одноатомного газа.

Энрико Ферми родился 29 сентября 1901 г. в Риме. Окончил Пизанский университет. В 1923 г. был командирован в Геттинген, а в 1924 г. посетил Пауля Эренфеста в Лейдене, который убедил Ферми в его незаурядных способностях к теоретической физике. В дальнейшем Ферми работал с выдающимся успехом и как теоретик, и как экспериментатор.

В декабре 1925 г. он, независимо от Дирака, разработал вариант квантовой статистики, излагаемый ниже. В 1933 г. Ферми создал количественную теорию β -распада, введя важное представление о слабом взаимодействии.

Замечательные экспериментальные исследования Ферми ядерных превращений положили начало нейтронной физике. В 1938 г. Ферми за открытие искусственной радиоактивности, вызванной бомбардировкой медленными нейтронами, присуждена Нобелевская премия по физике.

В связи с усиливающимися тенденциями фашизма Ферми покинул Италию и в 1938 г. переехал с семьей в США. Здесь он принимал активное участие в проекте создания атомной бомбы.

В послевоенный период Ферми продолжал активно работать, главным образом, по физике элементарных частиц. Ферми создал большую школу физиков, среди которых такие выдающиеся имена, как Э. Амальди, Э. Сегре, Б. Понтекорво, Э. Майоран, М. Гелл-Манн, Т. Ли, Ч. Янг, О. Чемберлен и др.

Член многих академий наук, Ферми был иностранным членом АН СССР с 1929 г.

*Ферми умер сравнительно рано, в ноябре 1954 г., 53-х лет. Личная жизнь Ферми увлекательно описана в книге его жены *).*

Статистика Ферми, наряду с принципом квантовой неразличимости одинаковых частиц, использует запрет Паули, согласно которому две частицы не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии. Принцип Паули блестяще оправдал себя для электронов атома — это следовало из спектроскопических данных.

Ферми, конечно, далек от мысли, что к частицам с различным спином применима разная статистика: бозе-эйнштейновская или открытая им. Вообще он никак не выражает своего отношения к статистике Бозе — Эйнштейна. Х. Казимир в сборнике, посвященном памяти Паули [52], пишет об этом периоде: «Были известны обе статистики: Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака, но они рассматривались как более или менее эквивалентные возможности, и вопрос, какая из них описывает поведение газов, состоящих из частиц с массой, отличной от нуля, оставался спорным».

По не вполне понятным соображениям Ферми не рассматривает идеальный газ в объеме V , а исследует набор невзаимодейству-

*) *Ферми Лаура*. Атомы у нас дома. — М.: ИЛ, 1958.

ющих квантовых осцилляторов частоты ν , с общим центром притяжения к началу координат O . Энергия одного осциллятора равна

$$\varepsilon = h\nu(s_1 + s_2 + s_3) = h\nu s, \quad (4.1)$$

где s_1, s_2, s_3 — квантовые числа трехмерного осциллятора. Ферми уже должно было быть известно, что собственное значение энергии для линейного осциллятора содержит нулевую энергию $(1/2)h\nu$; ее наличие, однако, несущественно для дальнейших рассуждений.

Каждое s -состояние осциллятора вырождено и может быть реализовано числом способов, равным

$$Q_s = (s+1)(s+2)/2, \quad (4.2)$$

где $s = s_1 + s_2 + s_3$. Таким образом, состояние $s=0$ не вырождено, $s=1$ — трехкратно вырождено, $s=2$ — шестикратно вырождено и т. д.

Пусть N_s — число осцилляторов в s -м состоянии, тогда из принципа Паули следует, что $N_s \leq Q_s$. Если заданы полное число осцилляторов N и их полная энергия $W = h\nu E$ (E — целое число), то

$$\sum_{s=1}^{\infty} N_s = N, \quad (4.3)$$

$$\sum_{s=0}^{\infty} s N_s = E. \quad (4.4)$$

Далее Ферми определяет термодинамическую вероятность W для принципиально неразличимых частиц (осцилляторов), подчиняющихся принципу Паули. Из условия максимума энтропии $S = -k \lg W$ при дополнительных условиях (4.3) и (4.4) получим обычным путем [2, с. 421]

$$N_s = Q_s \alpha e^{-\beta s} / (1 + \alpha e^{-\beta s}), \quad (4.5)$$

где α и β — неопределенные множители Лагранжа, которые могут быть найдены из (4.3) и (4.4).

Энергия отдельного осциллятора ε может быть в квазиклассическом приближении представлена как сумма кинетической и потенциальной энергии:

$$\varepsilon = h\nu s = E + 2\pi^2 \nu^2 m r^2, \quad (4.6)$$

где m — масса частицы, а r — ее расстояние до начала координат O .

Используя теперь (4.5) и (4.6), можно вычислить число осцилляторов $n(E)dE$ с кинетической энергией в интервале $E, E+dE$. Если сравнить полученное выражение с распределением Максвелла, то окажется, что

$$\beta = h\nu/kT, \quad (4.7)$$

где T — термодинамическая температура. В результате распределение по кинетическим энергиям в расчете на единицу объема в новой статистике приобретет вид

$$n(E) dE = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{Ae^{-E/kT}}{1 + Ae^{-E/kT}} E^{1/2} dE, \quad (4.8)$$

где

$$A = \alpha e^{-2\pi^2 v^2 m r^2 / kT}. \quad (4.8)$$

Полная концентрация частиц на расстоянии r равна

$$n = \int_0^{\infty} n(E) dE = F(A) \frac{(2\pi m kT)^{3/2}}{h^3}, \quad (4.9)$$

где

$$F(A) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} \frac{Ae^{-x}}{1 + \frac{A}{x}} x^{1/2} dx. \quad (4.10)$$

Средняя кинетическая энергия частиц на расстоянии r равна

$$\bar{E} = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} E n(E) dE = \frac{3}{2} kT \frac{G(A)}{F(A)}, \quad (4.11)$$

где

$$G(A) = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} \frac{Ae^{-x}}{1 + \frac{A}{x}} x^{3/2} dx. \quad (4.12)$$

Равенство (4.10) определяет функцию $F(A)$, поэтому из соотношения (4.9) параметр A может быть выражен как функция концентрации n и температуры T . Теперь средняя кинетическая энергия \bar{E} определена как функция n и T .

Давление может быть вычислено по теореме вириала:

$$P = (2/3) n\bar{E} = nkT [G(A)/F(A)] \quad (4.13)$$

и, следовательно, тоже определяется, как функция концентрации n и температуры T . Мы видим, что A играет роль вспомогательного числового параметра и его связь (4.8а) с потенциальной энергией осциллятора нигде не фигурирует.

Можно думать, что когда при больших r , т. е. малых A , концентрация частиц (осцилляторов) становится малой, их поведение подчиняется классической статистике. Действительно, пренебрегая в знаменателях подынтегральных выражений в (4.10) и (4.12) слагаемым, пропорциональным A , по сравнению с единицей, мы получим для средней кинетической энергии \bar{E} и давления P классические выражения: $\bar{E} = (3/2) kT$ и $P = nkT$.

Для того чтобы определить физические условия, соответствующие отсутствию вырождения газа*), вычислим величину A , когда она меньше единицы. В этом случае $F(A) = A$, и тогда из (4.9) следует, что $A = nh^3/(2\pi mkT)^{3/2}$. Мы видим, что классическому поведению газа способствует малая концентрация n , большая масса частиц m и высокая температура T . Наоборот, большая концентрация, малая масса частиц и низкая температура способствуют вырождению. Нетрудно убедиться в том, что легчайшие газы при повышенном давлении и низкой температуре обнаруживают меньшие отступления от классического поведения, чем отступления от идеальности, связанные с взаимодействием молекул газа. Так же легко убедиться в том, что свободные электроны в металле при сколь угодно высоких температурах ведут себя, как сильно вырожденный идеальный газ.

Разлагая $F(A)$ и $G(A)$ в ряд по малым A , можно определить поправки на вырождение к средней кинетической энергии \bar{E} и давлению P .

Уравнение состояния (например, в случае слабого вырождения) приобретает вид

$$P = nkT [1 + (1/16) nh^3/(\pi mkT)^{3/2} + \dots]. \quad (4.14)$$

Для больших A , соответствующих сильному вырождению (низкие температуры и большие концентрации), Ферми пользуется асимптотическим разложением функций $F(A)$ и $G(A)$; в этом случае он получает

$$\bar{E} = (3/40) (6/\pi)^{2/3} h^2 n^{2/3} / m + 2^{1/3} \pi^{8/3} mk^2 T^2 / 3^{2/3} h^2 n^{2/3} + \dots, \quad (4.15)$$

$$P = (1/20) (6/\pi)^{2/3} h^2 n^{5/3} / m + 2^{4/3} \pi^{8/3} mk^2 T^2 / 3^{5/3} h^2 n^{-1/3} + \dots \quad (4.16)$$

Из этих выражений видно, что при абсолютном нуле температуры ($T=0$) средняя кинетическая энергия и давление в системе отличны от нуля (нулевая энергия и нулевое давление). Легко видеть, что существование нулевой энергии и нулевого давления является прямым следствием запрета Паули ($N_s \leq Q_s$).

Из (4.15) следует, что теплоемкость при постоянном объеме для низких температур равна

$$C_V = d\bar{E}/dT = (2^{4/8} \pi^{8/3} mk^2 T / 3^{2/3} / h^2 n^{2/3}). \quad (4.17)$$

Мы видим, что теплоемкость C_V при стремлении температуры к нулю ($T \rightarrow 0$), в согласии с теоремой Нернста, стремится к нулю.

Важные результаты вытекают при применении статистики Ферми к свободным электронам в металле. Первой работой в этом направлении была работа Паули [63], объяснившая малое значение и слабую температурную зависимость парамагнетизма электронов проводимости в металлах.

При абсолютном нуле температуры все свободные электроны в металле заполняют, в соответствии с принципом Паули, все фа-

*) В данном случае под вырождением понимается отступление в поведении идеального газа от классического; в другом смысле термин «вырождение» употребляется в квантовой механике, как кратность состояний, соответствующих определенному уровню энергии.

зовые ячейки объема h^3 до некоторого максимального импульса p_0 . В пределах одной ячейки можно поместить два электрона с противоположно направленными спинами (аналогично электронам в атомных оболочках). Если имеется всего N электронов, занимающих объем V , то

$$2V(4/3)\pi p_0^3/h^3=N. \quad (4.18)$$

Таким образом, максимальная энергия электронов ϵ_0 при $T=0$ равна

$$\epsilon_0=(1/2m)p_0^2=(h^2/2m)(3n/8\pi)^{2/3}, \quad (4.19)$$

где $n=N/V$ — концентрация электронов. Так как при абсолютном нуле температуры средняя энергия \bar{E} равна $3/5$ от максимальной энергии ϵ_0 , то соотношение (4.19) совпадает с (4.15), если в последнем учесть спин.

Для типичных металлов максимальная энергия электронов ϵ_0 будет порядка нескольких электронвольт. Каждый электрон, как известно, обладает магнитным моментом, равным магнетону Бора: $\mu_B=eh/4\pi mc=e\hbar/2mc$. Если бы электроны подчинялись классической статистике Больцмана и $\mu_B H \ll kT$ (где H — напряженность магнитного поля), то магнитная восприимчивость электронов проводимости равнялась бы [2, с. 170]:

$$\chi_{кл}=n\mu_B^2/kT. \quad (4.20)$$

На опыте, однако, магнитная восприимчивость примерно на два порядка меньше и почти не зависит от температуры. Для того чтобы объяснить эти особенности магнитной восприимчивости, необходимо учесть вырождение электронов проводимости. Хотя спину электрона, с энергетической точки зрения, выгодно ориентироваться по магнитному полю, сделать это внутри одной ячейки объема h^3 из-за принципа Паули он не может. Электроны будут переходить в свободные ячейки над уровнем энергии ϵ_0 до тех пор, пока выигрыш в энергии (связанный с переориентацией спина), равный $2\mu_B H$, будет превышать потери, связанные с переходом в более высокие энергетические состояния. Таким образом, вблизи энергии ϵ_0 образуется слой толщины $\Delta\epsilon=2\mu_B H$, в котором магнитные моменты электронов направлены вдоль напряженности поля H .

Так как число ячеек h^3 в единице объема на единицу интервала энергии равно $g(\epsilon)=4\cdot 2^{1/2}\pi m^{3/2}\epsilon^{1/2}/h^3$ [2, с. 75], то магнитный момент, образующийся в слое $\Delta\epsilon$,

$$M=\mu_B g(\epsilon_0)\Delta\epsilon=\mu_B^2(8\cdot 2^{1/2}\pi m^{3/2}/h^3)\epsilon_0^{1/2}H,$$

а связанная с ним магнитная восприимчивость равна

$$\chi_{выр}=M/H=\mu_B^2(8\cdot 2^{1/2}\pi m^{3/2}/h^3)\epsilon_0^{1/2}. \quad (4.21)$$

Из (4.20) и (4.21) следует, что

$$\chi_{выр}/\chi_{кл}\approx kT/\epsilon_0, \quad (4.22)$$

где мы в правой части опустили множитель порядка единицы. При комнатной температуре энергия kT будет порядка 0,02—0,03 эВ, а ϵ_0 — порядка нескольких электронвольт. Таким образом, отношение (4.22) будет порядка нескольких процентов. Паули вычислил и следующий, зависящий от температуры член в восприимчивости $\chi_{\text{выр}}$; он примерно в $(kT/\epsilon_0)^2$ раз меньше не зависящего от температуры члена, даваемого выражением (4.21).

Одним из наиболее фундаментальных противоречий, с которым столкнулась классическая электронная теория металлов, было участие свободных электронов в общей теплоемкости металлов. Все данные говорили за то, что число свободных электронов должно быть порядка числа атомов решетки, а это, с точки зрения самых общих положений классической статистики, должно было заметно увеличивать теплоемкость металла. Между тем теплоемкости металлов, так же как и диэлектриков, хорошо удовлетворяют закону Дюлонга и Пти, не учитывающему свободные электроны. Если мы учтем, однако, что «эффективная толщина» энергетического слоя для теплового возбуждения вырожденных электронов порядка kT , то молярная теплоемкость при постоянном объеме электронов в металле должна быть

$$C_V \approx R kT/\epsilon_0. \quad (4.23)$$

Более точный расчет Зоммерфельда [64] дает в правой части (4.23) дополнительный множитель $\pi^2/2$. Если не учитывать спина, то в расчете на один электрон (4.23) совпадает с (4.17). Обширная работа Зоммерфельда (см. также [65]) объяснила не только «участие» свободных электронов металла в его проводимости, но и содержала много других важных результатов. В ней были даны теории эффекта Ричардсона, электро- и теплопроводности металлов, термоэлектричества, явления Томсона и Пельте, эффекта Холла и изменения сопротивления металла в магнитном поле. Теория Зоммерфельда была, однако, основана на том же классическом рассмотрении движения свободных электронов, что и электронная теория металлов Друде—Лорентца. В ней только максвелловское распределение электронов по скоростям было заменено на распределение Ферми. Теория Зоммерфельда не позволила теоретически вычислить длину свободного пробега электрона и не давала объяснения, почему эта длина свободного пробега получалась из опытных данных на два порядка больше среднего расстояния между атомами решетки. Последнее было объяснено учеником Гейзенберга Феликсом Блохом [66], который рассмотрел, с квантово-механической точки зрения, движение электрона в периодическом поле решетки металла.

РОЖДЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. ТЕОРИЯ ДИСПЕРСИИ

Исследования в течение 1919—1925 гг., которые в конце концов привели к созданию квантовой механики, могут рассматриваться как систематические догадки, руководимые принципом соответствия. Среди них важную роль сыграли квантовые обобщения классической теории дисперсии. Существенный шаг в этом направлении был сделан Рудольфом Ладенбургом, бывшим учеником Рентгена, работавшим впоследствии в США, в Принстоне. Работа Ладенбурга [67] была посвящена квантовой интерпретации классической теории дисперсии света. Из классической электронной теории для показателя преломления n разреженного газа молекул следует выражение [24, с. 132]

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{\pi m} \frac{N}{v_1^2 - v^2}. \quad (1.1)$$

Здесь e и m — заряд и масса электрона, N — число дисперсионных электронов в единице объема, колеблющихся с собственной частотой v_1 , v — частота света падающей волны; в (1.1) предполагается, что затухание при колебании мало.

Как перевести выражение (1.1) на язык теории строения атомов Бора? Если дисперсионный электрон колеблется вдоль оси x , параллельной электрическому вектору световой волны, то его координата меняется по закону $x = x_0 \cos 2\pi v_1 t$. Средняя энергия такого электрона равна его удвоенной средней потенциальной энергии:

$$\bar{U} = 2 \cdot 2\pi^2 m v_1^2 \bar{x}^2 = 2\pi^2 m v_1^2 x_0^2.$$

С другой стороны, энергия, излучаемая N такими электронами в 1 с, согласно классической электродинамике [24, с. 87], равна

$$W_e = N (16\pi^4 e^2 / 3c^3) v_1^4 x_0^2 = (8\pi^2 e^2 v_1^2 / 3mc^3) N \bar{U}. \quad (1.2)$$

Если молекулы газа находятся в равновесии с излучением при температуре T и если мы рассматриваем электроны как трехмерные осцилляторы, то между средней потенциальной энергией \bar{U} и плотностью излучения ρ_ν имеется следующее соотношение (1.1.2)*):

$$\bar{U} = (3c^3 / 8\pi v_1^2) \rho_\nu. \quad (1.3)$$

*) Множитель 3 в выражении для \bar{U} связан с предположением о трехмерности осциллятора.

Из (1.2) и (1.3) следует, что

$$W_e = (\pi e^2/m) N \rho_\nu. \quad (1.4)$$

Заметим, что излучение, выраженное формулой (1.4), учитывает, с квантовой точки зрения, как спонтанные, так и индуцированные переходы.

Как интерпретировать число электронов N на языке квантовой теории? Воспользуемся для этого понятиями, введенными Эйнштейном при выводе им формулы Планка (см. гл. I, раздел 3). Пусть излучение молекулы обусловлено переходом электрона из стационарного состояния 2 в состояние 1. Число таких спонтанных переходов в 1 с равно $N_2 A'_2$, где N_2 — число молекул в 1 см³ в состоянии 2 и A'_2 — вероятность такого перехода в 1 с. Число переходов из нижнего состояния 1 в верхнее состояние 2, связанное с поглощением света, равно $N_1 B_1^2 \rho_\nu$, где N_1 — число молекул в 1 см³ в состоянии 1 и B_1^2 — вероятность перехода 1 → 2.

Таким образом, энергия поглощения равна

$$W_a = \hbar \nu_1 N_1 B_1^2 \rho_\nu. \quad (1.5)$$

Предполагая для простоты, что статистические веса состояний 1 и 2 одинаковы, $P_1 = P_2$, получим из (1.3.6а) и (1.3.4а)

$$B_1^2 = (c^3/8\pi\hbar\nu_1^3) A'_2,$$

поэтому

$$W_a = N_1 (c^3/8\pi\nu_1^2) A'_2 \rho_\nu. \quad (1.6)$$

В равновесии энергия излучения W_e (1.4) равна энергии поглощения W_a (1.6), поэтому

$$N = N_1 (mc^3/8\pi^2 e^2 \nu_1^2) A'_2. \quad (1.7)$$

С точки зрения квантовой теории переходу 2 → 1 соответствует частота ν_1 , определяемая условием частот Бора:

$$\nu_1 = (E_2 - E_1)/\hbar. \quad (1.8)$$

Исключая N из (1.1) посредством (1.7), получим выражение

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{8\pi^2} \frac{N_1 A'_2}{\nu_1^2 (\nu_1^2 - \nu^2)}, \quad (1.9)$$

являющееся естественным квантовым обобщением классического выражения (1.1).

Выражение (1.9) может быть обобщено на случай, когда возможен ряд переходов ($i \rightarrow 1$), связанных с излучением (конечно, переходы $i \rightarrow 1$ должны быть разрешены правилами отбора);

тогда вместо (1.9) получим

$$n^2 = 1 + \frac{c^3}{8\pi^3} \sum_i \frac{N_1 A_i'}{v_i^2 (v_i^2 - v^2)}, \quad (1.10)$$

где

$$v_i = (E_i - E_1) / h. \quad (1.10a)$$

Дисперсионное выражение (1.10) имеет место, если состояние 1 является основным (наинизшим), так что возможны только переходы, связанные с излучением фотона частоты (1.10a).

Г. А. Крамерс [68] учел, что состояние 1 может быть неосновным (возбужденным), так что на него возможны переходы из низших состояний j , связанные с поглощением фотона частоты

$$v_j = (E_1 - E_j) / h. \quad (1.11)$$

Естественным обобщением (1.10) в этом случае является выражение

$$n^2 = 1 + \frac{c^3}{8\pi^3} \left[\sum_i \frac{f_i'}{v_i^2 (v_i^2 - v^2)} - \sum_j \frac{f_j}{v_j^2 (v_j^2 - v^2)} \right]. \quad (1.12)$$

Здесь f_i' и f_j пропорциональны числу атомов в состоянии 1 и вероятностям переходов $i \rightarrow 1$ и $j \rightarrow 1$.

Здесь не будет рассматриваться имеющийся экспериментальный материал по проверке классической и квантовой теорий дисперсии.

2. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ГЕЙЗЕНБЕРГА

Рождение современной квантовой механики началось с выдающейся работы немецкого теоретика Вернера Гейзенберга [69] под названием «О новом квантово-механическом толковании кинематических и механических соотношений». За эту работу Гейзенберг в 1932 г. была присуждена Нобелевская премия.

Вернер Гейзенберг родился 5 декабря 1901 г. в Вюрцбурге. Учился в Мюнхенском университете непосредственно у Зоммерфельда. Затем был аспирантом у Макса Борна в Геттингене. Был направлен рокфеллеровским стипендиатом к Нильсу Бору, с которым тесно общался много лет.

Наряду с упомянутой выше работой Гейзенбергу принадлежат многие другие выдающиеся открытия в физике, которые мы частично рассмотрим дальше. В 1926 г. он объяснил наличие пара- и ортотермов в спектре атомов гелия (см. гл. XI, раздел 1). В 1927 г. Гейзенберг сформулировал соотношение неопределенностей и дал им правильное толкование (см. гл. X, раздел 2). Ему принадлежат также важные работы по атомному ядру, квантовой теории поля, космическим лучам, теории элементарных частиц и др.

Гейзенберг умер в феврале 1976 г.

Свою замечательную работу Гейзенберг сделал в июне 1925 г.

Мне кажется уместным привести полностью введение к работе Гейзенберга:

«Как известно, против формальных правил квантовой теории, служащих для определения наблюдаемых величин, например энергии атома водорода, может быть выдвинуто обвинение, что они существенно используют соотношения между величинами, которые, по-видимому, принципиально не наблюдаемы, например положение и период обращения электрона.

Таким образом, правилам квантовой теории недостает наглядных физических представлений, если только не надеяться, что в будущем эти, пока еще не наблюдаемые величины можно будет наблюдать на опыте. Эту надежду можно было бы рассматривать, как обоснованную, если бы правила были внутренне непротиворечивы и были бы применимы к определенной ограниченной области квантово-теоретических проблем.

Опыт показал, однако, что эти формальные квантовые правила применимы только к атому водорода и к штарк-эффекту этого атома. Проблема «скрещенных полей» — атом водорода в электрическом и магнитном полях разных направлений — приводит к фундаментальным трудностям.

Реакция атома на периодически меняющееся во времени поле тоже не описывается вышеупомянутыми правилами. И, наконец, распространение этих квантовых правил на поведение атомов со многими электронами тоже оказалось невозможным.

Обычно эту неприменимость квантовых правил, основанных на определенных представлениях классической механики, пытаются объяснить отступлением от классической механики. Эту точку зрения трудно признать обоснованной, поскольку условие частот Эйнштейна—Боровске (которое всегда выполняется) является уже полным отказом от классической механики, или, точнее, от точки зрения волновой теории, связанной с кинематикой движения. Таким образом, даже в простейших квантово-механических проблемах не может быть и речи о применении классической механики.

При такой ситуации кажется более разумным полностью отказаться от пока не наблюдаемых величин (положение и период обращения электрона), т. е. считать, что частичное совпадение квантовых правил с опытными данными более или менее случайно. Мы должны попытаться построить, аналогично классической механике, квантово-теоретическую *) механику, в которой имели бы место соотношения только между наблюдаемыми величинами.

Как первая предпосылка такой квантово-теоретической механики должна, наряду с условием частот, служить дисперсионная теория Крамерса и некоторые развивающие ее работы.

В дальнейшем мы хотим получить некоторые новые квантово-механические соотношения и применить их для полного описания ряда специальных задач. При этом мы ограничимся системами с одной степенью свободы».

*) Термин Гейзенберга, используемый в дальнейшем.

В соответствии с высказанным Гейзенбергом принципом — пользоваться только наблюдаемыми величинами — попытаемся перевести классические соотношения в квантово-теоретические.

Для периодического движения координата электрона $x(n, t)$ в n -м квантовом состоянии ($n=0, 1, 2, \dots$) может быть разложена в ряд Фурье:

$$x(n, t) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} x_{\tau}(n) e^{i\tau\omega(n)t}. \quad (2.1)$$

Здесь $x_{\tau}(n)$ — амплитуда, соответствующая гармонике частоты $\tau\omega(n)$. Так как $x(n, t)$ вещественны, то $x_{-\tau} = x_{\tau}^*$ (где верхний индекс означает комплексно-сопряженную величину).

Каков «закон умножения» величин $x(n, t)$? То есть, как выражается величина $x^2(n, t)$ (которая тоже периодична) через $x(n, t)$? Очевидно,

$$\begin{aligned} x^2(n, t) &= x(n, t) x(n, t) = \sum_{\tau'} x_{\tau'}(n) e^{i\tau'\omega(n)t} \sum_{\tau''} x_{\tau''}(n) e^{i\tau''\omega(n)t} = \\ &= \sum_{\tau'} \sum_{\tau''} x_{\tau'}(n) x_{\tau''}(n) e^{i(\tau'+\tau'')\omega(n)t} = \sum_{\tau} \sum_{\tau'} x_{\tau'}(n) x_{\tau-\tau'}(n) e^{i\tau\omega(n)t}, \end{aligned}$$

где мы обозначили $\tau' + \tau'' = \tau$. Сравнивая третье звено этих равенств с последним, получим правило умножения для частот гармоник:

$$\tau'\omega(n) + (\tau - \tau')\omega(n) = \tau\omega(n). \quad (2.2)$$

Итак, умножение классических величин $xy = z$ происходит по схеме

$$\sum_{\tau'} x_{\tau'} e^{i\tau'\omega t} \sum_{\tau-\tau'} y_{\tau-\tau'} e^{i(\tau-\tau')\omega t} = \sum_{\tau} z_{\tau} e^{i\tau\omega t}, \quad (2.3)$$

т. е.

$$\sum_{\tau'} x_{\tau'} y_{\tau-\tau'} = z_{\tau}. \quad (2.4)$$

Очевидно, что умножение yx происходит по схеме

$$\sum_{\tau'} y_{\tau'} x_{\tau-\tau'} = z_{\tau}. \quad (2.5)$$

Так как τ' пробегает все значения ($-\infty < \tau' < +\infty$), то (2.4) равно (2.5) и для умножения имеет место перестановочный закон.

Классические уравнения движения для $x(n, t)$ позволяют, в принципе, определить все амплитуды $x_{\tau}(n)$ и соответствующие частоты $\tau\omega(n)$; при этом уравнения движения могут быть нелинейны (например, в случае ангармонического осциллятора) и тогда частоты складываются, согласно правилу (2.2). Таким образом, мы можем определить спектр движения, а следовательно, и следующий из классической электродинамики электромагнитный спектр излучения.

Опыт, однако, показывает, что истинный спектр, излучаемый атомами, не соответствует классическому спектру излучения; он подчиняется комбинационному принципу, согласно которому все

частоты излучения

$$\omega(n, m) = T_n - T_m \quad (2.6)$$

зависят от двух квантовых чисел n и m и представляют собой разности двух термов T_n и T_m , характерных для атома.

Совокупностям членов Фурье в разложении (2.1) сопоставим величины

$$x_{nm} = x(n, m) e^{i\omega(n, m)t}. \quad (2.7)$$

Классическое условие $x_{-n}(n) = x_n(n)^*$ заменим условием

$$x(n, m) = x(m, n)^*. \quad (2.8)$$

По какому правилу должны умножаться квантовые величины (2.7) так, чтобы выполнялся комбинационный принцип (2.6)?

Обозначим полную совокупность величин (2.7) через $\|x(n, m) \exp[i\omega(n, m)t]\|$ и подчиним их умножение комбинационному принципу (2.6):

$$\|x(n, m) e^{i\omega(n, m)t}\| \cdot \|y(n, m) e^{i\omega(n, m)t}\| = \|z(n, m) e^{i\omega(n, m)t}\|.$$

Нетрудно видеть, что если умножение величин (2.7) подчинить правилу

$$z(n, m) = \sum_{l=1}^{\infty} x(n, l) y(l, m), \quad (2.9)$$

то комбинационный принцип (2.6) выполняется; в самом деле, в этом случае

$$\omega(n, m) = \omega(n, l) + \omega(l, m). \quad (2.10)$$

Но это как раз есть то, чего требует комбинационный принцип; ибо из (2.10) и (2.6) вытекает, что

$$\omega(n, l) + \omega(l, m) = T_n - T_l + T_l - T_m = T_n - T_m = \omega(n, m). \quad (2.11)$$

Закон умножения (2.9) не обладает свойством перестановочности (коммутативности), так как в общем случае

$$\sum_l x(n, l) y(l, m) \neq \sum_l y(n, l) x(l, m).$$

Гейзенберг не знал, что закон умножения (2.9) соответствует правилу умножения матриц, т. е. он не понимал, что величины (2.7) — матрицы. Это впервые понял М. Борн.

Переведем на новый квантово-теоретический язык условие квантования (5.1.12), т. е. кратность фазового интеграла постоянной Планка:

$$\oint p dx = \oint m \dot{x}^2 dt = nh. \quad (2.12)$$

Здесь $p = m\dot{x}$ — импульс, сопряженный координате x . Используя в (2.12) разложение Фурье для $x(n, t)$, получим для фазового

интеграла

$$\oint m \dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\tau} \tau^2 |x_{\tau}(n)|^2 \omega(n). \quad (2.13)$$

В самом деле, из (2.1) следует

$$\begin{aligned} \dot{x}^2 &= \sum_{\tau} x_{\tau}(n) i \tau \omega(n) e^{i\tau\omega(n)t} \sum_{\tau'} x_{\tau'}(n) i \tau' \omega(n) e^{i\tau'\omega(n)t} = \\ &= -\omega^2(n) \sum_{\tau\tau'} \tau\tau' x_{\tau}(n) x_{\tau'}(n) e^{i(\tau+\tau')\omega(n)t}. \end{aligned}$$

При интегрировании по t остаются только члены с $\tau + \tau' = 0$ ($\tau = -\tau'$). Учитывая, что $x_{\tau} x_{-\tau} = |x_{\tau}|^2$ и $\oint dt = 2\pi/\omega(n)$, получим (2.13).

Далее Гейзенберг пишет:

«Фазовый интеграл (2.13) приравнивался обычно целому, кратному от h , т. е. равному nh ; такое требование представляется не только весьма искусственным для всего механического расчета, но и весьма произвольным с точки зрения принципа соответствия, согласно которому фазовый интеграл определяется с точностью до аддитивной постоянной, как целое, кратное от h ; в соответствии с этим естественно вместо (2.12) положить

$$\frac{d}{dn} \oint m \dot{x}^2 dt = \frac{d}{dn} (nh) \quad (2.14)$$

или, используя (2.13),

$$2\pi m \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau (d/dn) [\tau \omega(n) |x_{\tau}(n)|^2] = h. \quad (2.14a)$$

Такое условие определяет, правда, величины x_{τ} тоже с точностью до постоянной; эта неопределенность эмпирически привела к трудностям, связанным с половинными квантовыми числами.

Если мы поставим вопрос о соответствующем (2.14a) квантово-теоретическом соотношении между наблюдаемыми величинами, то эта утерянная однозначность легко восстанавливается (это будет показано ниже — А. А.)».

В действительности только уравнение (2.14a) может быть естественно преобразовано в духе теории дисперсии Крамерса к следующему квантово-теоретическому виду:

$$2\pi m \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} [\omega(n+\tau, n) |x(n+\tau, n)|^2 - \omega(n, n-\tau) |x(n, n-\tau)|^2] = h. \quad (2.15)$$

Здесь $\omega(n+\tau, n)$ и $x(n+\tau, n)$ — величины, введенные нами в (2.6) и (2.7).

Для оправдания вида выражения (2.15) отметим замечание Гейзенберга, что, по «сути дела», Крамерс находит для электрического момента атома, индуцированного волной $E \cos 2\pi\nu t$.

выражение

$$M = e^2 E \cos 2\pi \nu t \frac{2}{h} \sum_{\tau} \left[\frac{|x(n, n+\tau)|^2 \nu(n, n+\tau)}{\nu^2(n, n+\tau) - \nu^2} - \frac{|x(n, n-\tau)|^2 \nu(n, n-\tau)}{\nu^2(n, n-\tau) - \nu^2} \right].$$

Действительно, сравнение этого выражения с (2.15) указывает на схожесть их структуры. Такая интерпретация крамеровского выражения теории дисперсии (1.12) оказалась возможной при использовании результатов ряда развивающих ее работ (Кун, Томас и др.; см. [22, с. 120]).

Так как квадратные скобки в выражении (2.15) не меняются при замене τ на $-\tau$, то (2.15) можно переписать в виде

$$4\pi t \sum_{\tau > 0} [\omega(n+\tau, n)|x(n+\tau, n)|^2 - \omega(n, n-\tau)|x(n, n-\tau)|^2] = h. \quad (2.16)$$

При $\tau=0$ квадратная скобка равна нулю.

Применим полученные соотношения к линейному гармоническому осциллятору. Классическое уравнение движения линейного гармонического осциллятора имеет вид

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad (2.17)$$

где x — координата осциллятора, ω — круговая частота его колебаний ($\omega = (\kappa/m)^{1/2}$, где κ — коэффициент квазиупругой силы, m — масса осциллятора).

Основная идея Гейзенберга — придерживаясь как можно ближе схемы классических отношений, избавляться от всех ненаблюдаемых величин. Очевидно, координату $x(t)$ следует заменить величиной $x(n, l) \exp[i\omega(n, l)t]$, тогда (2.17) приобретает вид

$$[-\omega^2(n, l) + \omega^2]x(n, l) = 0, \quad (2.18)$$

где мы обе части сократили на множитель $\exp[i\omega(n, l)t] \neq 0$.

Мы видим, что $x(n, l)$ может быть отлично от нуля только в том случае, когда

$$\omega(n, l) = \omega. \quad (2.19)$$

Таким образом, $x(n+\tau, n)$ и $x(n, n-\tau)$ в (2.16) отличны от нуля, только если $\omega(n+\tau, n) = \omega(n, n-\tau) = \omega$. Далее, в силу чисто гармонического движения осциллятора $\tau = \pm 1$ (нет обертонов) и (2.16) приобретает вид

$$4\pi t \omega [|x(n+1, n)|^2 - |x(n, n-1)|^2] = h. \quad (2.20)$$

Если увеличить n на 1, то второе слагаемое в (2.20) равно первому. Мы можем сказать, что $2t\omega |x(n, n-1)|^2$ увеличивается на $\hbar = h/2\pi$, когда n увеличивается на 1.

Если основное (невозбужденное) состояние осциллятора соответствует квантовому числу $n=0$, то не существует квантовых состояний с $n < 0$, поэтому $|x(0, -1)|^2 = 0$; тогда из (2.20) следует

$$2t\omega |x(n, n-1)|^2 = n\hbar. \quad (2.21)$$

Ясно, что, в соответствии со сказанным Гейзенбергом, неопределенность в величинах $x(n+\tau, n)$ снимается.

Вычислим теперь по новому квантово-теоретическому методу полную энергию линейного гармонического осциллятора. В классической механике его энергия равна

$$E = (m/2) \dot{x}^2 + (m\omega^2/2) x^2. \quad (2.22)$$

Мы должны теперь величины x и \dot{x} заменить, согласно (2.7), но так как и в квантовой области энергия должна быть вещественна, то напишем выражение, наиболее близкое к (2.22):

$$\begin{aligned} E &= (m/2) \sum_{\tau=\pm 1} \dot{x}_{n\tau} \dot{x}_{n\tau}^* + (m\omega^2/2) \sum_{\tau=\pm 1} x_{n\tau} x_{n\tau}^* = \\ &= (m/2) |x(n+1, n)|^2 \omega^2 + (m/2) |x(n, n-1)|^2 \omega^2 + \\ &+ (m\omega^2/2) |x(n+1, n)|^2 + (m\omega^2/2) |x(n, n-1)|^2 = \\ &= m\omega^2 [|x(n+1, n)|^2 + |x(n, n-1)|^2]. \quad (2.23) \end{aligned}$$

Мы видим, что энергия E не зависит от времени, т. е. мы доказали закон сохранения энергии. Как мы увидим дальше, с матричной точки зрения это означает, что энергия изображается диагональной матрицей.

Используя (2.21) для определения обоих слагаемых в квадратной скобке для E , находим

$$E = \hbar\omega (n+1/2). \quad (2.24)$$

Мы получили правильное выражение для энергии осциллятора с учетом нулевой энергии $\hbar\omega/2$.

Наряду с линейным гармоническим осциллятором, движение которого описывается уравнением (2.17), Гейзенберг рассмотрел ангармонический осциллятор, подчиняющийся уравнению

$$d^2x/dt^2 + \omega^2 x + \lambda x^2 = 0. \quad (2.25)$$

На этом мы останавливаться не будем.

3. МАТРИЧНАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ*)

Как я отметил выше, Гейзенберг сделал свое открытие в июне 1925 г.; уже в июле он переслал рукопись работы своему профессору Максу Борну в Геттинген. Борн быстро распознал в законе умножения (2.9) правила умножения матриц и совместно с П. Йорданом [70], а затем и с Гейзенбергом [71] создал то, что впоследствии получило название матричной квантовой механики.

Говорят, что когда Паули ознакомился с работой Гейзенберга, он воскликнул: «Какой гениальный невежда!»

*) При изложении этого раздела я придерживаюсь книги Уиттекера [1, v. II, p. 253].

Переведем идеи Гейзенберга на язык матриц.

Из предыдущего раздела известно, что динамическая переменная x должна быть заменена величинами x_{nm} (2.7), т. е. таблицей

$$x = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \equiv \|x_{mn}\|. \quad (3.1)$$

Произведение динамических переменных xy удовлетворяет закону (2.9):

$$(xy)_{nm} = \sum_l x_{nl} y_{lm} = \sum_l x(n, l) y(l, m), \quad (3.2)$$

если выполняется комбинационный принцип

$$\omega(n, m) = \omega(n, l) + \omega(l, m). \quad (3.3)$$

Закон умножения (3.2) совпадает с правилом умножения матриц (3.1), установленным в матричном исчислении [72, с. 122].

Рассмотрим некоторые свойства конечных матриц n -го ранга, т. е. таблиц n^2 величин, содержащих n строк и n столбцов:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Матрицы считаются равными, если все элементы матрицы A равны соответствующим элементам матрицы B :

$$a_{ik} = b_{ik} \quad (i, k = 1, 2, \dots, n). \quad (3.5)$$

Суммой матриц A и B называется матрица, элементы которой равны сумме соответствующих элементов обеих матриц:

$$A + B = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \dots & a_{1n} + b_{1n} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \dots & a_{2n} + b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} + b_{n1} & a_{n2} + b_{n2} & \dots & a_{nn} + b_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Под произведением матрицы A на вещественное или комплексное число k понимается матрица, все элементы которой равны элементам матрицы A , помноженным на k , т. е. $kA = \|ka_{mn}\|$.

Рассмотрим теперь матрицы A и B как соответствующие линейные преобразования:

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ &\dots \\ y_n &= a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n \end{aligned} \right\} y = Ax, \quad (3.7)$$

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= b_{11}y_1 + b_{12}y_2 + \dots + b_{1n}y_n \\ u_2 &= b_{21}y_1 + b_{22}y_2 + \dots + b_{2n}y_n \\ &\dots \\ u_n &= b_{n1}y_1 + b_{n2}y_2 + \dots + b_{nn}y_n \end{aligned} \right\} u = By. \quad (3.7a)$$

Под произведением матриц BA (читается справа налево: матрицы A на матрицу B) мы будем понимать матрицу C прямого преобразования от x к u , т. е.

$$u = By = BAx = Cx. \quad (3.8)$$

Таким образом,

$$C = BA. \quad (3.9)$$

Из (3.7), (3.7a) и (3.8) имеем

$$u_l = \sum_k b_{lk} y_k = \sum_k \sum_l b_{lk} a_{kl} x_l = \sum_l c_{ll} x_l, \quad c_{ll} = \sum_k b_{lk} a_{kl}. \quad (3.9a)$$

Правило умножения матриц (3.9a) совпадает с правилом умножения величин (2.7), введенным Гейзенбергом. Последний просто не знал, что говорил на языке матриц.

Умножение матриц (3.9) не обладает свойством коммутативности, так как $\sum_k b_{lk} a_{kl} \neq \sum_k a_{ik} b_{ki}$ ($BA \neq AB$). Однако произведение

матриц удовлетворяет ассоциативному и дистрибутивному (распределительному) законам: $A(BC) = (AB)C$ и $A(B+C) = AB + AC$. Условию (2.8) соответствует для данной матрицы A условие

$$a_{ik} = a_{ki}^*. \quad (3.10)$$

В этом случае матрица A называется эрмитовой. Матрица, у которой все элементы равны нулю, называется нулевой. Легко видеть, что произведение нулевой матрицы на любую матрицу и любой матрицы на нулевую равно нулевой матрице.

Элементы матрицы a_{ii} ($i=1, 2, \dots, n$) называются диагональными; они расположены вдоль диагонали от верхнего левого угла к нижнему правому. Матрица, у которой отличны от нуля только диагональные элементы, называется диагональной. Диагональная матрица с элементами $a_{ik} = \delta_{ik}$, где $\delta_{ik} = 1$ при $i=k$ и 0 при $i \neq k$, называется единичной; она обозначается как

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \|\delta_{ik}\|. \quad (3.11)$$

Легко видеть, что произведение единичной матрицы на любую другую и произведение любой другой на единичную равно этой матрице:

$$1A = A1 = A. \quad (3.11a)$$

Производная от матрицы A , зависящей от скалярного аргумента t , с элементами $a_{ik}(t)$ равна матрице с элементами $\partial a_{ik} / \partial t$:

$$\partial A(t) / \partial t = (\partial / \partial t) \|a_{ik}(t)\| = \|\partial a_{ik}(t) / \partial t\|. \quad (3.12)$$

Производная от функции $f(A)$, зависящей от матрицы A , по

матрице A , равна

$$df(A)/dA = \lim_{\alpha \rightarrow 0} (1/\alpha) [f(A + \alpha I) - f(A)], \quad (3.13)$$

где I — единичная матрица (3.11). Мы видим, что дифференцирование матриц по скалярному аргументу и дифференцирование функций от матриц определяется в согласии с обычными правилами дифференциального исчисления.

Хотя выше мы рассмотрели свойства конечных матриц, большинство рассмотренных правил применимо и к бесконечным матрицам (в частности, к матрицам координаты q и импульса p).

Возвратимся теперь к работе Борна и Иордана. Они рассмотрели механическую систему с одной степенью свободы, подчиняющуюся каноническим уравнениям Гамильтона:

$$dq/dt = \partial \mathcal{H} / \partial p, \quad dp/dt = -\partial \mathcal{H} / \partial q, \quad (3.14)$$

здесь q — обобщенная координата, p — сопряженный ей импульс и $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p)$ — функция Гамильтона. В соответствии с идеями Гейзенберга Борн и Иордан сохраняют общую форму уравнений (3.14), но под q и p понимают следующие матрицы:

$$q = \| q(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \|, \quad p = \| p(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \|. \quad (3.15)$$

Здесь $\omega(n, m)$ — круговая частота, причем

$$\omega(n, m) = T_n - T_m, \quad (3.16)$$

где T_n, T_m — спектроскопические термы. Учитывая, что $\omega(n, m) = -\omega(m, n)$, естественно предположить, что матрицы q и p эрмитовы, — это совпадает с предположением Гейзенберга (2.8).

Так как $\omega(n, n) = 0$, то диагональные элементы матриц (3.15) не зависят от времени. Естественно считать, что если производная от матрицы равна нулю, то она диагональна. Каков физический смысл этих диагональных элементов? При разложении классической величины $x(t, n)$ в ряд Фурье не зависящий от времени член равен среднему по времени от величины $\overline{x(t, n)}$ в состоянии n . С точки зрения принципа соответствия естественно считать, что не зависящие от времени диагональные элементы $x(n, n)$ можно интерпретировать как значения динамической переменной x в стационарном состоянии с квантовым числом n . В частности, из закона сохранения энергии $d\mathcal{H}/dt = 0$ в общем случае*) вытекает, что матрица энергии \mathcal{H} диагональна. При этом диагональные элементы матрицы \mathcal{H}_{nn} равны значениям энергии атома в стационарном состоянии n : $\mathcal{H}_{nn} = E_n$. Отсюда непосредственно следует условие частот Бора (5.1.7).

Борн и Иордан в своей работе, непосредственно последовавшей за работой Гейзенберга, вывели важное равенство, получившее название соотношений коммутации. Мы знаем, что, вообще говоря, произведение матриц не удовлетворяет перестановочному закону,

*) Случай вырожденных систем требует особого рассмотрения.

поэтому произведения pq и qp могут быть различны. Борн и Иордан показали, что разность $(pq - qp)$ — диагональная матрица, все элементы которой равны $\hbar/2\pi i = \hbar/i$, т. е.

$$pq - qp = (\hbar/i) \mathbf{1}, \quad (3.17)$$

где $\mathbf{1}$ — единичная матрица.

Дадим простое доказательство (3.17), следуя Уиттекеру [1, v. II, p. 260]. Из (3.15) имеем

$$dq/dt = \|\dot{\omega}(n, m) q(n, m) e^{i\omega(n, m)t}\| = (i/\hbar) (\mathcal{H}q - q\mathcal{H}). \quad (3.18)$$

В самом деле,

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}q - q\mathcal{H})_{nm} &= \sum_r (\mathcal{H}_{nr} q_{rm} - q_{nr} \mathcal{H}_{rm}) = \\ &= (\mathcal{H}_{nn} - \mathcal{H}_{mm}) q(n, m) e^{i\omega(n, m)t} = \hbar \omega(n, m) q(n, m) e^{i\omega(n, m)t}. \end{aligned}$$

Учитывая первое из канонических уравнений движения в матричной форме:

$$dq/dt = \partial\mathcal{H}/\partial p, \quad dp/dt = -\partial\mathcal{H}/\partial q, \quad (3.19)$$

получим из (3.18)

$$\mathcal{H}q - q\mathcal{H} = (\hbar/i) \partial\mathcal{H}/\partial p. \quad (3.20)$$

Поэтому уравнение

$$fq - qf = (\hbar/i) \partial f/\partial p \quad (3.21)$$

справедливо для $f = \mathcal{H}$ (см. выше) и $f = q$ (тривиально).

Далее, легко показать, что если (3.21) справедливо для $f = a$ и $f = b$, то оно имеет место для $f = a + b$ и $f = ab$. Так как все функции матриц, фигурирующие у нас, — последовательные умножения и сложения матриц, то (3.21) выполняется, если f — некоторая функция \mathcal{H} и q ; но именно такой функцией \mathcal{H} и q является p , поскольку $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p)$, поэтому (3.21) имеет место для $f = p$, но тогда оно совпадает с (3.17).

Борн и Иордан, подобно Гейзенбергу, рассмотрели задачу о линейном гармоническом осцилляторе. Их результат совпадает с результатом Гейзенберга (2.24), но метод решения, использующий понятия матричного исчисления, отличен.

Квантовая функция Гамильтона для линейного гармонического осциллятора имеет вид

$$\mathcal{H} = (1/2m) p^2 + (1/2) m\omega^2 q^2. \quad (3.22)$$

Здесь ω — частота осциллятора, q — матрица его координаты и $p = m\dot{q}$ — матрица его сопряженного импульса. Из (3.22) и (3.19) следует квантовое уравнение движения

$$d^2q/dt^2 + \omega^2 q = 0. \quad (3.23)$$

Оно имеет решение

$$q = Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t}, \quad (3.24)$$

где A и B — матрицы, не зависящие от времени.

Сопряженный импульс осциллятора равен

$$p = m\dot{q} = im\omega (Ae^{i\omega t} - Be^{-i\omega t}). \quad (3.25)$$

Отсюда следует, что квантовая функция Гамильтона (3.22) равна

$$\mathcal{H} = (1/2m)(im\omega)^2 (Ae^{i\omega t} - Be^{-i\omega t})^2 + \\ + (1/2)m\omega^2 (Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t})^2 = m\omega^2 (AB + BA), \quad (3.26)$$

где мы учли некоммутативность матриц A и B .

Нетрудно видеть, что для того, чтобы матрица \mathcal{H} была диагональной, надо положить

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \alpha_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & \beta_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

т. е. в матрицах A и B должны быть отличны от нуля только диагонали, ближайшие и параллельные главной. В самом деле, в этом случае

$$\mathcal{H} = m\omega^2 (AB + BA) = m\omega^2 \begin{pmatrix} \alpha_1\beta_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_2\beta_2 + \alpha_3\beta_3 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Для определения $\alpha_i\beta_i$ воспользуемся коммутационными соотношениями. Из (3.17), (3.24) и (3.25) получим

$$(\hbar/i)1 = pq - qp = 2im\omega (AB - BA). \quad (3.29)$$

Отсюда и из (3.27) вытекает, что

$$(\hbar/i)1 = 2im\omega \begin{pmatrix} -\alpha_1\beta_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_1\beta_1 - \alpha_2\beta_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_2\beta_2 - \alpha_3\beta_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Приравнивая соответствующие элементы матриц слева и справа, получим

$$\alpha_1\beta_1 = (\hbar/2m\omega), \quad \alpha_2\beta_2 = 2(\hbar/2m\omega), \quad \alpha_3\beta_3 = 3(\hbar/2m\omega). \quad (3.31)$$

Подставляя эти значения в (3.28), находим

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \hbar\omega/2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3\hbar\omega/2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5\hbar\omega/2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Таким образом, собственные значения энергии осциллятора равны

$$\mathcal{H}_{nn} = E_n = \hbar\omega (n + 1/2), \quad (3.33)$$

что совпадает с (2.24).

Так как q — эрмитова матрица, то из (3.24) и (3.27) следует,

что α_i и β_i комплексно сопряжены; тогда из (3.31) вытекает, что

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= (\hbar/2m\omega)^{1/2} e^{i\delta_1}, & \alpha_2 &= (2\hbar/2m\omega)^{1/2} e^{i\delta_2}, \dots, \\ \beta_1 &= (\hbar/2m\omega)^{1/2} e^{-i\delta_1}, & \beta_2 &= (2\hbar/2m\omega)^{1/2} e^{-i\delta_2}, \dots, \end{aligned} \quad (3.34)$$

где δ_i — произвольные фазы. Полагая $\delta_i = \gamma_i - \pi/2$, получим из (3.24), (3.25) и (3.34)

$$q = i(\hbar/2m\omega)^{1/2} \times \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\omega t + \gamma_1)} & 0 & 0 & \dots \\ -e^{i(\omega t + \gamma_1)} & 0 & 2^{1/2} e^{-i(\omega t + \gamma_2)} & 0 & \dots \\ 0 & -2^{1/2} e^{i(\omega t + \gamma_2)} & 0 & 3^{1/2} e^{-i(\omega t + \gamma_3)} & \dots \\ 0 & 0 & -3^{1/2} e^{i(\omega t + \gamma_3)} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

$$p = m\dot{q} = (m\omega\hbar/2)^{1/2} \times \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\omega t + \gamma_1)} & 0 & 0 & \dots \\ e^{i(\omega t + \gamma_1)} & 0 & 2^{1/2} e^{-i(\omega t + \gamma_2)} & 0 & \dots \\ 0 & 2^{1/2} e^{i(\omega t + \gamma_2)} & 0 & 3^{1/2} e^{-i(\omega t + \gamma_3)} & \dots \\ 0 & 0 & 3^{1/2} e^{i(\omega t + \gamma_3)} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Мы видим, что q и p — эрмитово-сопряженные матрицы. Таким образом, мы определили матрицы, соответствующие динамическим переменным q и p .

Квадраты модулей элементов матрицы q связаны с электрическим моментом дипольного перехода, т. е. с вероятностью соответствующего перехода, а следовательно, с коэффициентами Эйнштейна A_m^n для спонтанного излучения (см. гл. I, раздел 3).

Работа Борна и Йордана оказалась очень важной: кроме ряда приложений, в ней была сформулирована матричная форма квантовой механики и введены соотношения коммутации.

Третья работа Борна, Гейзенберга и Йордана этой серии [71] была направлена в печать 19 ноября 1925 г., т. е. менее чем через 4 месяца после поступления в журнал первой работы Гейзенберга. В этой работе трех авторов был достигнут дальнейший прогресс в развитии общих принципов матричной квантовой механики.

Первый важный результат касался теории канонических преобразований динамических переменных q и p . Можно в общем случае показать, что если

$$pq - qp = (\hbar/i) 1, \quad (3.37)$$

$$dq/dt = \partial \mathcal{H}(q, p) / \partial p, \quad dp/dt = -\partial \mathcal{H}(q, p) / \partial q, \quad (3.38)$$

то гамильтониан $\mathcal{H}(q, p)$ — диагональная матрица, причем диагональные элементы — возможные значения энергии системы (мы убедились в этом на примере линейного гармонического осциллятора).

Под каноническим преобразованием в матричной квантовой механике мы будем понимать такой переход к новым динамическим переменным Q и \mathcal{P} , чтобы выполнялись условия

$$\mathcal{P}Q - Q\mathcal{P} = (\hbar/i)1, \quad (3.39)$$

$$dQ/dt = \partial\mathcal{H}(Q\mathcal{P})/\partial\mathcal{P}, \quad d\mathcal{P}/dt = -\partial\mathcal{H}(Q\mathcal{P})/\partial Q. \quad (3.40)$$

Такие условия имеют место, если положить

$$Q = S q S^{-1}, \quad \mathcal{P} = S p S^{-1}, \quad (3.41)$$

где S — произвольная*) постоянная матрица, а S^{-1} — матрица, обратная S : $S S^{-1} = S^{-1} S = 1$. В самом деле, из (3.37), (3.38) и (3.41) вытекают (3.39) и (3.40).

Действительно, если $f(q, p)$ — степенная функция q и p , то

$$S f(q, p) S^{-1} = f(S q S^{-1}, S p S^{-1}) = f(Q, \mathcal{P}).$$

Однако пока мы только установили, что соотношения (3.37) и (3.38) инвариантны относительно некоторого весьма общего преобразования (3.41). Использование канонических преобразований для решения некоторой динамической задачи основано на следующей теореме: матрицы q и p , удовлетворяющие соотношениям коммутации (3.37) и превращающие гамильтониан $\mathcal{H}(q, p)$ в диагональную матрицу, являются решением уравнений (3.38).

Таким образом, если нам надо решить динамическую задачу с гамильтонианом $\mathcal{H}(q, p)$, то можно поступить так: выберем любые матрицы q_0 и p_0 , удовлетворяющие соотношениям коммутации (это могут быть, например, матрицы для гармонического осциллятора с гамильтонианом \mathcal{H}_0); определим теперь такую матрицу S , чтобы преобразования

$$q = S q_0 S^{-1}, \quad p = S p_0 S^{-1} \quad (3.42)$$

превращали гамильтониан

$$\mathcal{H}(q, p) = S \mathcal{H}_0(q_0, p_0) S^{-1} \quad (3.43)$$

в диагональную матрицу; тогда (3.42) — решение нашей задачи. Уравнение (3.43) для определения матрицы S аналогично, в некотором смысле, уравнению в частных производных теории Гамильтона — Якоби классической механики [44, с. 184]; матрица S — функция действия.

Следующим вопросом, рассмотренным в работе трех авторов, была теория возмущений.

Пусть динамическая система задается гамильтонианом

$$\mathcal{H}(q, p) = \mathcal{H}_0(q, p) + \lambda \mathcal{H}_1(q, p) + \lambda^2 \mathcal{H}_2(q, p) + \dots, \quad (3.44)$$

где второе, третье и т. д. слагаемые справа, в некотором смысле, меньше предшествующих (λ — параметр малости). Допустим, что решение гамильтониана $\mathcal{H}_0(q_0, p_0)$ известно, так что матрицы q_0 и p_0 , удовлетворяющие соотношениям коммутации, делают гамиль-

*) Не сингулярная, т. е. с определителем, не равным нулю.

тониан $\mathcal{H}_0(q_0, p_0)$ диагональной матрицей. Задача сводится к нахождению такой матрицы S , чтобы преобразования

$$q = S q_0 S^{-1}, \quad p = S p_0 S^{-1} \quad (3.45)$$

делали матрицу

$$\mathcal{H}(q, p) = S \mathcal{H}_0(q_0, p_0) S^{-1} \quad (3.46)$$

диагональной. Было показано, как решить эту задачу методом последовательных приближений, т. е. с точностью до λ и λ^2 и т. д.

Наконец, теория была распределена на системы со многими степенями свободы. Если квантовые уравнения движения имеют вид

$$dq_k/dt = \partial \mathcal{H} / \partial p_k, \quad dp_k/dt = -\partial \mathcal{H} / \partial q_k, \quad (3.47)$$

то они должны быть дополнены перестановочными соотношениями:

$$\begin{aligned} p_k q_l - q_l p_k &= (\hbar/i) \delta_{kl} = \hbar/i \begin{cases} 1, & \text{при } k=l, \\ 0, & \text{при } k \neq l, \end{cases} \\ p_k p_l - p_l p_k &= 0, \\ q_k q_l - q_l q_k &= 0. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Среди тех, кто слушал лекции Гейзенберга в Кембридже летом 1925 г., был молодой студент-дипломант Поль Адриен Морис Дирак, который развил идеи Борна и Йордана в новой, но эквивалентной форме.

Поль Адриен Морис Дирак родился 8 августа 1902 г. в Бристоле (Англия). Окончил Бристольский и Кембриджский университеты. С 1932 по 1968 гг. был профессором Кембриджского университета, заведующим Лукасовской кафедрой, которую ранее возглавляли Ньютон и Максвелл. Дирак — один из создателей квантовой механики (см. гл. VIII, раздел 3). В 1927 г. он проквантовал электромагнитное поле, положив начало квантовой электродинамике (см. гл. XII, раздел 1).

В 1928 г. Дирак построил квантовую релятивистскую теорию движения электрона во внешнем поле и показал наличие у электрона спина (см. гл. XII, раздел 3). Ввел понятие о позитронах, предвосхитив их экспериментальное обнаружение (см. гл. XII, раздел 4). Независимо от Ферми открыл квантовую статистику частиц с полуцелым спином.

За создание квантовой механики Дирак совместно с Шредингером в 1933 г. удостоен Нобелевской премии по физике.

Дирак был членом Лондонского королевского общества и ряда академий мира. С 1931 г. он был иностранным членом АН СССР.

Умер Дирак в октябре 1984 г.

7 ноября Дирак направил в журнал Лондонского королевского общества работу [73], в которой идеи Гейзенберга были развиты в оригинальном виде.

Дирак исходил из выражения для классических скобок Пуассона (СП). Напомним, что СП для функций $f(q, p, t)$ и $g(q, p, t)$, зависящих от обобщенных координат системы q_1, q_2, \dots, q_n , сопряженных им импульсов p_1, p_2, \dots, p_n и времени t , называется

сумма

$$\sum_{i=1}^n [(\partial f / \partial q_i) (\partial g / \partial p_i) - (\partial f / \partial p_i) (\partial g / \partial q_i)] \equiv [f, g]. \quad (3.49)$$

Если f и g равны обобщенной координате или импульсу, то легко обнаружить, что

$$[q_i, q_k] = 0, \quad [p_i, p_k] = 0, \quad [q_i, p_k] = \delta_{ik}. \quad (3.50)$$

Очевидно, что СП для координаты и функции Гамильтона $\mathcal{H}(q, p, t)$ равна

$$[q_i, \mathcal{H}] = \sum_i (\partial q_i / \partial q_i) (\partial \mathcal{H} / \partial p_i) - (\partial q_i / \partial p_i) (\partial \mathcal{H} / \partial q_i) = \partial \mathcal{H} / \partial p_i = \dot{q}_i,$$

где мы воспользовались каноническими уравнениями движения (3.47). Аналогично,

$$[p_i, \mathcal{H}] = -\partial \mathcal{H} / \partial q_i = \dot{p}_i.$$

Мы можем теперь записать канонические уравнения движения (3.47) в следующей симметричной форме:

$$\dot{q}_i = [q_i, \mathcal{H}], \quad \dot{p}_i = [p_i, \mathcal{H}]. \quad (3.51)$$

СП удовлетворяют ряду важных соотношений, из которых мы приведем только некоторые:

$$\begin{aligned} \text{а) } [f, g] &= -[g, f], \\ \text{б) } [f_1 + f_2, g] &= [f_1, g] + [f_2, g], \\ [f, g_1 + g_2] &= [f, g_1] + [f, g_2], \\ \text{в) } [f f_2, g] &= [f_1, g] f_2 + f_1 [f_2, g], \\ [f, g_1 g_2] &= [f, g_1] g_2 + g_1 [f, g_2], \\ \text{г) } [q_i, g] &= \partial g / \partial p_i, \quad [p_i, g] = -\partial g / \partial q_i. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Уравнения (3.52б) означают, что СП содержат f и g линейно, в то время как уравнения (3.52в) соответствуют обычному правилу дифференцирования произведения. Так как уравнения движения классической механики (3.51) могут быть написаны посредством СП, то естественно думать, что квантовые уравнения движения могут быть выражены через квантовые СП. Мы будем предполагать, что квантовые СП удовлетворяют всем равенствам (3.52); при этом мы будем считать, что квантовые величины f_1 , f_2 , g_1 и g_2 , которые, вообще говоря, не коммутируют друг с другом, удовлетворяют равенствам (3.52). Можно вычислить квантовую СП $[f_1 f_2, g_1 g_2]$ двумя различными способами, используя первое или второе уравнение (3.52в), а именно:

$$\begin{aligned} [f_1 f_2, g_1 g_2] &= [f_1, g_1 g_2] f_2 + f_1 [f_2, g_1 g_2] = \\ &= [f_1, g_1] g_2 f_2 + g_1 [f_1, g_2] f_2 + f_1 [f_2, g_1] g_2 + f_1 g_1 [f_2, g_2] \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} [f_1 f_2, g_1 g_2] &= [f_1 f_2, g_1] g_2 + g_1 [f_1 f_2, g_2] = \\ &= [f_1, g_1] f_2 g_2 + f_1 [f_2, g_1] g_2 + g_1 [f_1, g_2] f_2 + g_1 f_1 [f_2, g_2]. \end{aligned}$$

Приравнивая оба результата, но учитывая некоммутативность квантовых величин, получим

$$(f_1 g_1 - g_1 f_1) / [f_1, g_1] = (f_2 g_2 - g_2 f_2) / [f_2, g_2].$$

Поскольку это условие выполняется для квантовых величин f_1 и g_1 , которые никак не связаны с величинами f_2 и g_2 , надо думать, что это отношение есть просто число, не зависящее от f_1 , f_2 , g_1 , g_2 . Опыт показывает, что это число равно $i\hbar = ih/2\pi$, где i — мнимая единица, h — постоянная Планка. К этому же результату приходим в случае больших квантовых чисел, когда, в согласии с принципом соответствия, квантовые СП переходят в классические СП (3.49).

Итак квантовые СП равны

$$[f, g] = (1/i\hbar) (fg - gf). \quad (3.53)$$

Пользуясь квантовыми СП, требуем, аналогично (3.50),

$$\begin{aligned} [q_i, q_k] &= (1/i\hbar) (q_i q_k - q_k q_i) = 0, \\ [p_i, p_k] &= (1/i\hbar) (p_i p_k - p_k p_i) = 0, \\ [q_i, p_k] &= (1/i\hbar) (q_i p_k - p_k q_i) = \delta_{ik}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

что совпадает с перестановочными (коммутационными) соотношениями Борна — Йордана (3.48).

Не прибегая к явному использованию матричного исчисления, Дирак получил таким образом все основные результаты, найденные ранее Гейзенбергом, Борном и Йорданом. Дирак ввел название « q -числа» для квантовых величин, в общем случае не коммутирующих друг с другом, и « c -числа» — для обычных классических величин.

Во второй работе [74] он применил свою теорию для расчета атома водорода и получил формулу спектра Бальмера. Это было сделано практически одновременно с Паули, который получил бальмеровскую формулу, используя матричную механику [75]. В этой же работе Паули рассмотрел эффект Штарка и устранил некоторые трудности, которые возникли в старой квантовой механике при рассмотрении атома водорода в скрещенных электрическом и магнитном полях.

Хотя было ясно, что матричная механика или некоммутативная алгебра Дирака правильно описывают атомные процессы, только после создания Шредингером волновой механики, физики получили конструктивный метод для описания атомных явлений.

ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА ШРЕДИНГЕРА

27 января 1926 г. в «Annalen der Physik» поступила первая статья Эрвина Шредингера, профессора теоретической физики Цюрихского университета. В короткий срок (до 21 июня) 1926 г. появился еще ряд обширных статей Шредингера, посвященных тому же вопросу — волновой (квантовой) механике.

Эрвин Шредингер родился 12 августа 1887 г. в Вене. Окончил Венский университет в 1910 г.; работал в Венском, Иенском и Бреславском университетах и Высшей технической школе в Штуттгарте. В 1921—1927 гг. Шредингер — профессор Цюрихского университета; именно здесь он создал главный труд своей жизни — волновую механику, за которую ему в 1933 г. была присуждена Нобелевская премия по физике. Необычный «творческий взрыв» его научной активности имел место, когда ему было уже 39 лет. Попутно заметим, что Эйнштейну в 1905 г. было 26 лет, Бору в 1913 г. — 28 лет, Гейзенбергу в 1925 г. — 24 года.

В 1927—1933 гг. Шредингер — профессор Берлинского университета, но в 1933 г. он покинул Германию, хотя ему непосредственно не угрожал нацистский «закон о неарийцах». После непродолжительной работы в Оксфордском университете он в 1941—1955 гг. стал директором Института высших исследований в Дублине (Ирландия), но в 1956 г. вернулся в Вену на должность профессора Венского университета.

Несмотря на выдающиеся достижения в квантовой теории, Шредингер не мог примириться с вероятностным толкованием ψ -функции.

Интересы Шредингера носили весьма разносторонний характер. Он занимался теорией цветов, статистической физикой, биологией.

Шредингер — член ряда академий наук, с 1934 г. — иностранный член АН СССР.

Умер Шредингер в январе 1961 г.

Гейзенберг в своей гениальной работе заложил философские основы квантовой механики и сформулировал ее матричную форму. Однако для практического рассмотрения атомных задач волновой метод Шредингера оказался много удобнее. Для того чтобы убедиться в этом, достаточно сравнить решение для атома водорода, полученное матричным методом [75], с соответствующим решением уравнения Шредингера. Кроме того, волновая механика имела и принципиальное значение; она открыла путь к вероятностной трактовке квантовой теории, позволила сформулировать соотношения неопределенностей Гейзенберга и принцип дополненности Бора. Эту сторону квантовой механики мы рассмотрим в гл. X.

Мы хотели бы представить исторический процесс становления волновой механики, отраженный в последовательных сообщениях Шредингера, не совпадающий, вообще говоря, с современным логическим построением. В предисловии Шредингера к первому изданию книги, содержащей его сообщения *) (ноябрь 1926 г.), он пишет: «... надо помнить, что объединенные здесь в одном томике работы возникли последовательно. Данные более поздних частей работы были автору часто неизвестны при изложении более ранних разделов. Это имело следствием не только то, что материал представлен не всегда в желательной систематической последовательности, но и то, что сами представления (понятия) изложены в их постепенном развитии».

Четыре статьи Шредингера, появившиеся под общим названием «Квантование, как проблема собственных значений» рассмотрены ниже в разделах 1, 2, 5, 6.

1. ВАРИАЦИОННЫЙ ВЫВОД ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ К АТОМУ ВОДОРОДА

Первая статья [76, с. 1] как раз посвящена этому вопросу.

Вот как Шредингер начинает статью: «В этом сообщении я хотел бы на примере простейшего случая атома водорода (в нерелятивистском и невозмущенном случае) показать, что обычные правила квантования могут быть заменены другим условием, в котором нет упоминания о целых числах. Целые числа появляются столь же естественно, как числа узлов колеблющейся струны. Новое представление может быть обобщено и, как я думаю, глубоко связано с сущностью квантовых предписаний.

Обычная форма квантовых условий связана с уравнением Гамильтона—Якоби [44, § 47]:

$$\mathcal{H}(q, \partial S_0 / \partial q) = E, \quad (1.1)$$

где \mathcal{H} — функция Гамильтона, S_0 — функция укороченного действия, q — обобщенные координаты, $p = \partial S_0 / \partial q$ — обобщенные импульсы и E — энергия стационарного состояния.

Автор вводит функцию ψ , полагая

$$S_0 = K \lg \psi, \quad (1.2)$$

где постоянная K имеет размерность действия (так же, как S_0).

Для электрона в атоме водорода в прямоугольных координатах выражение (1.1) имеет вид (e и m — заряд и масса электрона)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q, \partial S_0 / \partial q) - E = \\ = (1/2m) [(\partial S_0 / \partial x)^2 + (\partial S_0 / \partial y)^2 + (\partial S_0 / \partial z)^2] - (E + e^2/r) = 0, \end{aligned} \quad (1.3)$$

*) Здесь и далее мы пользуемся сборником оригинальных работ Шредингера [76].

где $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Так как $\partial S_0 / \partial x = (K/\psi)(\partial\psi/\partial x)$ и т. д., то

$$(\partial\psi/\partial x)^2 + (\partial\psi/\partial y)^2 + (\partial\psi/\partial z)^2 - (2m/K^2)(E + e^2/r)\psi^2 = 0. \quad (1.4)$$

Далее автор полагает равным нулю не (1.4), а вариацию интеграла от (1.4):

$$\delta J = \delta \iiint dx dy dz [(\partial\psi/\partial x)^2 + (\partial\psi/\partial y)^2 + (\partial\psi/\partial z)^2 - (2m/K^2)(E + e^2/r)\psi^2] = 0. \quad (1.5)$$

Это условие он обосновывает так: «Мы ищем такие реальные во всем пространстве, однозначные, конечные и дважды непрерывно дифференцируемые функции ψ , которые делают интеграл по всему пространству от (1.4) экстремальным. Это вариационное требование заменяет квантовые условия».

Из (1.5) непосредственно следует *)

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0, \quad (1.6)$$

$$\int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0, \quad (1.7)$$

где интегрирование в левой части (1.7) ведется по бесконечной поверхности с нормалью n . Мы называем уравнение (1.6) уравнением Шредингера для стационарных состояний. Уравнение (1.7) имеет значение для установления поведения несвязанных электронов на «гиперболических орбитах».

Шредингер рассматривает решение уравнения (1.6) в полярных координатах r, θ, φ , полагая $\psi = Y(\theta, \varphi)\chi(r)$. Для $Y(\theta, \varphi)$ получаются шаровые функции; $\chi(r)$ удовлетворяет уравнению

$$d^2\chi/dr^2 + (2/r)(d\chi/dr) + \{[2mE/K^2] + [2me^2/K^2r] - l(l+1)r^2\}\chi = 0, \quad (1.8)$$

где l — целое число; последнее есть необходимое условие для однозначности шаровых функций.

Далее исследуются случаи $E > 0$ (свободный электрон) и $E < 0$ (связанный электрон). В первом случае возможны все значения E — спектр носит непрерывный характер. Во втором случае ($E < 0$) конечные и непрерывные решения существуют, только если

$$E = -me^4/2K^2n^2, \quad (1.9)$$

где n — целое число, большее l ($n > l$)**). Из сравнения с (5.2.9) мы видим, что n — главное квантовое число, если положить $K =$

*) Вариация первых трех слагаемых под знаком интеграла в (1.5) равна $2 \iiint (\text{grad } \psi, \text{grad } \delta\psi) dx dy dz$. Далее, используем формулу на с. 188 из книги Н. Е. Кочина [77], полагая в ней $\psi = 1$, $\chi = \psi$ и $\varphi = \delta\psi$.

**) В соответствии с современными обозначениями мы поменяли между собой обозначения квантовых чисел n и l .

$=h/2\pi$, где h — постоянная Планка. Шредингер исследует уравнение (1.8) довольно громоздким способом (8,5 страниц!), который мы не воспроизводим здесь, поскольку более простой подход описан сейчас в любом курсе квантовой механики. Шредингер не вводит магнитного квантового числа m_l (определяющего зависимость шаровой функции от φ) и мельком говорит о физическом смысле орбитального квантового числа l , определяющего момент импульса электрона. Однако он отмечает: «Подсчитывая число постоянных в шаровой функции, равное, как известно, $2l+1$, мы получим: найденное решение для возможных значений n, l содержит $2l+1$ произвольных постоянных; таким образом, для заданного $n, -n^2$ произвольных констант». Отсюда прямо следует: если учесть спин, то заданной энергии $E(n)$ соответствует $2n^2$ -кратное вырождение.

Рассмотрим основное связанное состояние электронов в атоме водорода. В этом случае $n=1$ и $l=0$. Из уравнения (1.8) получим

$$(d\chi^2/dr^2) + (2/r)(d\chi/dr) + (2m/\hbar^2)(E_0 + e^2/r)\chi = 0. \quad (1.10)$$

Это уравнение легко решается подстановкой

$$\chi(r) = Ne^{-\alpha r}, \quad (1.11)$$

которая обеспечивает сходимость ψ -функции при $r \rightarrow \infty$; здесь N — нормировочный коэффициент, α — постоянная, которая может быть определена из уравнения (1.10); подставляя (1.11) в (1.10), получим

$$\alpha^2 - (2\alpha/r) + (2m/\hbar^2)(E_0 + e^2/r) = 0.$$

Для того чтобы это равенство выполнялось тождественно для всех r , необходимо, чтобы

$$\alpha^2 + (2m/\hbar^2)E_0 = 0, \quad \alpha - me^2/\hbar^2 = 0,$$

откуда

$$\alpha = me^2/\hbar^2 = 1/a_B, \quad E_0 = -me^4/2\hbar^2, \quad (1.12)$$

где a_B — боровский радиус, E_0 — энергия основного состояния атома водорода (5.1.5).

Нормировочная константа N определяется из условия

$$\int \psi^2 d\tau = \int_0^\infty \frac{1}{4\pi} N^2 e^{-2r/a_B} 4\pi r^2 dr = 1.$$

Здесь учтено, что $Y_{00} = 1/(4\pi)^{1/2}$. Интеграл берется элементарно, и мы получим $N = 2/a_B^{3/2}$; таким образом, собственная функция основного состояния равна

$$\psi(1S) = (1/\pi^{1/2} a_B^{3/2}) e^{-r/a_B}. \quad (1.13)$$

В конце статьи Шредингер высказывает ряд интересных физических соображений. В § 3 своего сообщения он пишет: «Представляется весьма естественным связать функцию ψ с некоторым

колебательным процессом в атоме. Такой колебательный процесс кажется сегодня более реальным, чем орбиты, приписываемые электронам. Вначале я тоже намеревался обосновать квантовые условия в этой наглядной форме, но затем предпочел более нейтральную математическую формулировку, которая сегодня более ясно описывает существование. Это существование представляется мне в том, что квантовые условия с их таинственными «требованиями целочисленности» заменяются более общим требованием — конечности и однозначности некоторой пространственной функции».

Шредингер отдает должное стимулирующему влиянию на него идей де Бройля. Он пишет: «В первую очередь я хотел бы отметить, что толчком к изложенным выше соображениям послужили остроумные идеи господина Луи де Бройля и, в частности, обдумывание по поводу пространственного распределения его «фазовых волн», в отношении которых он показал, что они всегда укладываются целое число раз вдоль траектории при периодическом движении электрона. Главное отличие заключается в том, что де Бройль оперирует с бегущими волнами, в то время как мы со стоячими». Может быть, правильнее было бы сказать, что Шредингер явно учел внешнее поле, действующее на электрон.

В связи с этим интересно свидетельство П. Л. Капицы [78, с. 366]: «Очень поучительна история, как Шредингер создал свои уравнения. Шредингер тогда работал у Дебая, который и рассказал мне подробности, как Шредингер пришел к своим уравнениям. Прочтя работу де Бройля в «Comptes Rendus», Дебай предложил Шредингеру рассказать о ней на семинаре. Шредингер на это ответил примерно так: «О такой чепухе я не хочу рассказывать». Но Дебай, как старший руководитель, сказал, что все же ему надо это сделать. Тогда Шредингеру пришлось согласиться, и он решил попытаться представить на семинаре идеи де Бройля в более удобопонимаемом математическом виде. Когда ему удалось это сделать, то он пришел к тем уравнениям, которыми прославился на весь мир и которые носят теперь его имя.

Дебай мне рассказал, что, когда Шредингер излагал свою работу на семинаре, он сам не понимал, какое крупное открытие сделал. Дебай тут же на семинаре сказал ему: «Вы сделали замечательную работу». Сам же Шредингер думал, что он только нашел хороший способ рассказать группе физиков о том, что сделал де Бройль. И это произошло через два года после того, как появилась работа де Бройля».

2. «ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ» И «ВОЛНОВАЯ» МЕХАНИКА

Вторая статья Шредингера под тем же названием [76, с. 224] была направлена в печать 26 февраля 1926 г., т. е. через месяц после первой статьи.

По сути дела, вторая статья должна была предшествовать первой, так как в ней физически обосновывается волновое уравнение

(1.6). Это отмечено в примечании автора, в котором указано, что для понимания второй статьи нет необходимости знакомиться с первой.

Вторая статья состоит из трех параграфов.

§ 1. Гамильтонова аналогия между механикой и оптикой

Эта аналогия, установленная Гамильтоном в 1824 г., заключается в утверждении, что движение консервативной механической системы происходит по тому же закону, что и распространение света в изотропной среде. При установлении этой аналогии мы воспользуемся, так же как и Шредингер, принципом Монпертюи. Но при изложении будем следовать не Шредингеру, а более простому изложению учебника Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица [44, с. 176]. Это тем более уместно, что результаты этого параграфа не оригинальны.

Вариационный принцип Гамильтона, из которого вытекают уравнения движения механики, имеет вид

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{H} \right) dt = \delta \int_1^2 \left(\sum p_i dq_i - \mathcal{H} dt \right) = 0. \quad (2.1)$$

Здесь $S(q, p)$ — функция действия, $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ — функция Лагранжа, $\mathcal{H}(q, p)$ — функция Гамильтона, q_i и p_i — обобщенные координаты и сопряженные им импульсы. Если \mathcal{L} и \mathcal{H} явно от времени не зависят и система консервативна, то

$$\mathcal{H} = T + V = (1/2) \sum_{i,k} a_{ik}(q) \dot{q}_i \dot{q}_k + V(q) = E = \text{const}, \quad (2.2)$$

где

$$T = (1/2) \sum_{i,k} a_{ik}(q) \dot{q}_i \dot{q}_k \quad (2.3)$$

— кинетическая энергия, а $V(q)$ — потенциальная энергия. В этом случае вариация (2.1) сводится к вариации укороченного действия:

$$S_0 = \int \sum_i p_i \dot{q}_i dt = \int \sum_i p_i dq_i. \quad (2.4)$$

В самом деле,

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \sum_i p_i \dot{q}_i dt - \delta E (t_1 - t_2) = \delta S_0 = 0. \quad (2.5)$$

Для определения траектории системы (в многомерном q -пространстве) надо выразить все p через q и dq .

Из (2.3) следует, что

$$dt = \left[\sum_{i,k} a_{ik} dq_i dq_k / 2(E - V) \right]^{1/2}, \quad (2.6)$$

так как

$$p_i = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i = \partial T / \partial \dot{q}_i = \sum_k a_{ik} \dot{q}_k, \quad (2.7)$$

то

$$S_0 = \int \sum_i p_i dq_i = \int \sum_{i,k} a_{ik} (\partial q_k / \partial t) dq_i = \\ = \int \left[2(E - V) \sum_{i,k} a_{ik} dq_i dq_k \right]^{1/2}, \quad (2.8)$$

где мы воспользовались (2.6).

Теперь (2.5) может быть записано в виде соотношения

$$\delta S_0 = \delta \int_1^2 \left[2(E - V) \sum_{i,k} a_{ik}(q) dq_i dq_k \right]^{1/2} = 0, \quad (2.9)$$

получившего название принципа Монпертюи, которое определяет форму траектории в многомерном q -пространстве.

Для сопоставления с оптикой рассмотрим движение одной частицы в поле $V(x, y, z)$; в этом случае кинетическая энергия

$$T = E - V = (m/2) (ds/dt)^2 = mv^2/2, \quad (2.10)$$

где $v = ds/dt$ — скорость частицы; из сравнения с (2.3) видим, что $a_{ik} = m$ (т. е. массе частицы), поэтому

$$\delta S_0 = \delta \int_1^2 [2m(E - V)]^{1/2} ds = \delta \int_1^2 mv ds. \quad (2.11)$$

Если $V = 0$ (частица движется по инерции), то

$$\delta \int_1^2 ds = 0, \quad (2.12)$$

т. е. она движется между точками 1 и 2 по кратчайшему пути (прямой линии).

С другой стороны, известно, что распространение лучей в геометрической оптике подчиняется принципу Ферма [79]:

$$\delta \int_1^2 ds/u = c \delta \int_1^2 n ds, \quad (2.13)$$

где $u(x, y, z)$ — фазовая скорость волны в точке x, y, z , $n = c/u$ — показатель преломления (c — скорость света в вакууме). Из сопоставления (2.13) с (2.11) следует, что траектория частицы и путь луча будут совпадать, если

$$u(x, y, z) = A/[2m(E - V(x, y, z))]^{1/2}, \quad (2.14)$$

где A — постоянная, имеющая размерность энергии; кинетическая энергия $E - V = mv^2/2$, поэтому

$$u = \frac{A/m}{v}. \quad (2.15)$$

Шредингер поступает несколько по-другому. Он замечает, что функция действия $S(q, p, t)$ удовлетворяет уравнению Гамильтона — Якоби [44, § 47]:

$$\partial S/\partial t + \mathcal{H}(q, \partial S/\partial q, t) = 0. \quad (2.16)$$

Если система голономна и консервативна, то можно положить

$$S = -Et + S_0(q, p), \quad (2.17)$$

где постоянная интегрирования E имеет смысл полной энергии системы, а $S_0(q, p)$ — функция укороченного действия. В самом деле, подставляя (2.17) в (2.16), получим

$$\mathcal{H}(q, \partial S_0/\partial q) = E, \quad (2.18)$$

где $S_0(q, p)$ совпадает с (2.4).

Рассматривая в (2.16) $S = \text{const}$ как поверхность постоянной фазы, Шредингер показал, что фазовая скорость $u(q)$ (в q -пространстве) равна

$$u(q) = u = E/[2(E - V)]^{1/2} \quad (2.19)$$

и, следовательно, размерный множитель в (2.14) равен E^* .

Необходимо помнить, что аналогия между механикой и оптикой, описанная выше, есть аналогия между классической механикой и геометрической оптикой. В ней фигурирует только понятие о фазовой поверхности $S = \text{const}$, но важные понятия волновой оптики: длина волны, ее частота и амплитуда никакого отражения в аналогии не получают.

Можно было бы думать, что так устроена природа. По этому поводу Шредингер пишет: «Однако уже первая попытка формирования волновой картины ведет к таким замечательным результатам, что невольно возникает другая мысль: сегодня уже нам известно, что наша классическая механика при очень малых размерах траектории и сильных ее искривлениях неверна. Может быть, это обстоятельство — полная аналогия с неприменимостью геометрической оптики, т. е. оптики с бесконечно малой длиной волны, которая наступает тогда, когда «экраны» и «отверстия» недостаточно велики по сравнению с действительной длиной волны. Может быть, наша классическая механика — полная аналогия геометрической оптики и как таковая неверна, т. е. не соответствует реальности, когда радиус кривизны и размер траектории невелики по сравнению с определенной длиной волны, которая реально существует в q -пространстве. Тогда возникает необходимость в развитии некоторой «волновой механики».

Это Шредингер и делает в следующем параграфе.

*) Заметим, что Шредингер определяет «скорость системы» в многомерном q -пространстве как $[2(E - V)]^{1/2}$, поэтому в случае одной частицы она равна $m^{1/2}v$, где v — скорость и m — масса частицы.

§ 2. «Геометрическая» и «волновая» механика

В этом параграфе Шредингер рассматривает монохроматическую волну, т. е. предполагает, что «волновая функция» зависит от $\sin(\dots)$; очевидно, аргумент синуса линейно зависит от фазы S , поэтому имеем

$$\sin(2\pi S/h + \text{const}) = \sin(-2\pi Et/h + 2\pi S_0(q)/h + \text{const}), \quad (2.20)$$

где константа h имеет размерность действия. Таким образом, частота равна

$$\nu = E/h. \quad (2.21)$$

Определим теперь длину волны λ для отдельно движущейся частицы. Очевидно,

$$\lambda = u/\nu = h/[2m(E-V)]^{1/2} = h/mv = h/p, \quad (2.22)$$

где $p = mv$ — импульс частицы. Если считать, что h — постоянная Планка, то это выражение совпадает с нерелятивистским приближением соотношения де Бройля (7.1.5).

Выражая энергию E через частоту ν (см. (2.21)) и подставляя последнее в фазовую скорость (2.19), получим

$$u = h\nu/[2(h\nu - V)]^{1/2}, \quad (2.23)$$

т. е. закон дисперсии для волн материи. Мы отмечали, что фазовая скорость u не совпадает со скоростью системы v (2.10); они в некотором смысле взаимно обратны (см. (2.15)). Если мы, однако, вычислим групповую скорость волн материи по формуле (7.1.7), то получим

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\nu}{d(1/\lambda)} = \frac{d\nu}{d(\nu/u)} = v, \quad (2.24)$$

т. е. групповая скорость $v_{\text{гр}}$ для частицы совпадает с ее скоростью v . Этот результат уже имеется у де Бройля, но у него он следовал из релятивистского соотношения для свободной частицы. Сейчас мы видим, что он вытекает и в нерелятивистском случае для частицы (системы) в поле V .

Шредингер пытался отождествлять сами частицы с волновыми пакетами. Как известно, подобная интерпретация волновой механики неправомерна, хотя бы в силу того, что волновые пакеты с течением времени расплываются, что не наблюдается в отношении частиц.

Как же следует поступать, когда классическая «геометрическая» механика неприменима и надо строить волновую механику.

В этом случае надо, по-видимому, исходить из волнового уравнения с фазовой скоростью u , определяемой выражением (2.19). Тогда получим

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0. \quad (2.25)$$

Здесь ∇^2 — оператор Лапласа в q -пространстве. Для монохроматической волны (2.20) и фазовой скорости (2.19) находим

$$-\frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{8\pi^2 (E - V)}{h^2} \psi.$$

В результате получим волновое уравнение

$$\nabla^2 \psi + (8\pi^2 / h^2) (E - V) \psi = 0, \quad (2.26)$$

которое совпадает с выражением (1.6), полученным в первом сообщении из вариационного принципа.

Особое преимущество волнового уравнения (2.26) Шредингер видит в том, что прежний метод определения квантовых уровней энергии системы происходит в два этапа: 1) определение всех возможных движений и 2) искусственное выделение некоторых из них посредством квантовых условий. Сейчас же задача сводится к решению уравнения (2.26) при некоторых естественных предположениях об однозначности и конечности волновой функции ψ ; при этом квантовые уровни системы определяются как собственные значения уравнения, в большинстве случаев уже известные из математической физики.

Далее Шредингер упоминает о матричной квантовой механике, созданной Гейзенбергом, Борном и Йорданом. Он высоко оценивает эти работы и пишет, что достигнутые в них результаты не вызывают сомнения, что эти работы, во всяком случае, содержат «часть истины». Он отмечает, что их тенденция, несомненно, чрезвычайно близка изложенным выше соображениям, однако методы настолько различны, что ему пока не удалось согласовать обе точки зрения (как мы увидим ниже, это удалось ему через три недели!).

Наконец, в § 3, последнем параграфе этой статьи, Шредингер применяет волновое уравнение (2.26) к некоторым простым системам: линейному гармоническому осциллятору, жесткому ротатору и нежесткому ротатору (двухатомной молекуле). Полученные им результаты можно найти почти в любом курсе квантовой механики (см., например, [80]). Заметим, что Шредингер учитывает взаимодействие между колебаниями и вращением двухатомной молекулы, однако при этом не учитывает ангармонизма колебаний.

3. НЕПРЕРЫВНЫЙ ПЕРЕХОД ОТ МИКРО- К МАКРОМЕХАНИКЕ

В следующем своем сообщении [76, с. 56] Шредингер получает результат, который кажется ему имеющим общее значение, но, на самом деле, — специфичный для рассматриваемой им системы. Он исследует поведение пакета из волновых функций линейного гармонического осциллятора с большими квантовыми числами, мало отличающимися друг от друга. Как показывает анализ вопроса, такой пространственно ограниченный волновой пакет длительное время не расплывается и движется в точности так, как по законам классической механики движется частица, изображающая гармонический осциллятор. По этому поводу Шредингер пишет:

«Наш волновой пакет остается длительно неизменным, т. е. не растекается со временем по большой области так, как мы, например, привыкли наблюдать в оптике». Он связывает последнее обстоятельство с тем, что пакеты в оптике конструируются из непрерывного множества волн, в то время как в волновой механике — из дискретного множества. Шредингер высказывает также надежду, что волновые пакеты с обнаруженным выше характером поведения удастся построить и в других случаях, например для движения электрона в атоме водорода по орбитам с большими квантовыми числами. Все это привело Шредингера к идее об отождествлении самих частиц с волновыми пакетами. Сейчас мы знаем, что эта идея неправильна, так как волновые пакеты из волн материи в общем случае расплываются и, следовательно, не могут изображать дискретные частицы; на самом деле волны материи являются волнами вероятности, определяющими поведение частиц. Однако Шредингер длительное время отстаивал эту неверную точку зрения.

4. СВЯЗЬ МЕЖДУ МЕХАНИКОЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА — БОРНА — ИОРДАНА И МЕХАНИКОЙ ШРЕДИНГЕРА

В следующем сообщении [76, с. 62] Шредингер делает примечание о том, что эта статья выпадает из ряда сообщений под общим названием «Квантование, как проблема собственных значений», но является существенной для уяснения дальнейшего.

Шредингер замечает, что, несмотря на совершенно различный подход к построению микромеханики у Гейзенберга и у него, уровни энергии осциллятора и ротатора получаются одинаковыми и одинаково отличаются от тех, которые получились при квантовании по Планку — Бору.

В квантовой механике Гейзенберга — Борна — Иордана оперируют с бесконечным числом алгебраических уравнений для дискретных величин — элементов матриц; в волновой механике Шредингера решается дифференциальное уравнение в частных производных для функции, зависящей от времени и всех координат системы. Задача заключается в том, чтобы показать эквивалентность обоих подходов.

С замечательной проницательностью Шредингер сопоставляет обобщенному импульсу p_i оператор $\hat{p}_i = (\hbar/2\pi i) \partial/\partial q_i$, после этого он вычисляет разность

$$\hat{p}_i q_i - q_i \hat{p}_i = (\hbar/2\pi i) [(\partial/\partial q_i) q_i - q_i (\partial/\partial q_i)].$$

Так как $(\partial/\partial q_i) q_i u(q) = q_i (\partial u/\partial q_i) + u(q)$, где $u(q) \equiv u(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots)$, то

$$(\hbar/2\pi i) [(\partial/\partial q_i) q_i - q_i (\partial/\partial q_i)] = \hbar/2\pi i. \quad (4.1)$$

Любой величине в классической механике может быть сопоставлен оператор; например, кинетической энергии соответствует

оператор

$$\begin{aligned} \hat{T} &= (1/2m) \hat{p}^2 = (1/2m) (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = \\ &= -(\hbar^2/8\pi^2m) (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2) = (-\hbar^2/8\pi^2m) \nabla^2. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Такое сопоставление оператора механической величине возможно только в том случае, когда последняя зависит от обобщенных импульсов p_i степенным образом. Так как оператором координаты является простое умножение на нее, то оператор Гамильтона для частицы во внешнем поле $V(x, y, z)$ равен

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + V(x, y, z) = -(\hbar^2/8\pi^2m) \nabla^2 + V. \quad (4.3)$$

Волновое уравнение (2.26) можно теперь записать в виде

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi. \quad (4.4)$$

Заметим, что Шредингер записывает левую часть этого уравнения в виде $[\hat{\mathcal{H}}, \psi]$. Конечно, в общем случае произвольной консервативной системы оператор кинетической энергии \hat{T} — однородная квадратичная функция обобщенных импульсов \hat{p}_i .

Операторное равенство (4.1) похоже на равенство в матричной квантовой механике (8.3.17), которое мы называли соотношением коммутации. Для того чтобы преобразовать операторное равенство (4.1) в матричное, поступим следующим образом. Выберем некоторую полную систему ортонормированных функций $u_1(q), u_2(q), \dots$, для которых

$$\int u_i(q) u_k(q) dq = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{при } i=k, \\ 0 & \text{при } i \neq k, \end{cases} \quad (4.5)$$

где $dq \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_l \dots$. Заметим, что Шредингер считает функции u_i вещественными, так как в общем случае вместо (4.5) надо писать

$$\int u_i^*(q) u_k(q) dq = \delta_{ik}, \quad (4.5a)$$

где u_i^* комплексно сопряжено с u_i .

Далее Шредингер строит матрицы по следующему «рецепту». Пусть $\mathcal{F}(q, \hat{p})$ и $G(q, \hat{p})$ — операторы механических величин \mathcal{F} и G (\hat{p}_i — операторы обобщенных импульсов, входящих в \mathcal{F} и G степенным образом). Определим элементы матриц этих величин следующим образом:

$$\mathcal{F}_{ik} = \int u_i \mathcal{F}(q, \hat{p}) u_k dq, \quad G_{ik} = \int u_i G(q, \hat{p}) u_k dq. \quad (4.6)$$

Конечно, в общем случае u_i должны быть заменены на u_i^* . Матричный элемент суммы операторов равен

$$(\hat{\mathcal{F}} + \hat{G})_{ik} = \mathcal{F}_{ik} + G_{ik}. \quad (4.7)$$

Шредингер показывает, что матричный элемент произведения опе-

раторов равен

$$(\hat{\mathcal{F}}\hat{G})_{ik} = \int u_i \hat{\mathcal{F}} \hat{G} u_k (dq) = \sum_l \mathcal{F}_{il} G_{li}; \quad (4.8)$$

это совпадает с правилом умножения матриц (8.3.9а); для доказательства надо функцию $G u_k(q)$ разложить в ряд по полной системе ортонормированных функций u_1, u_2, \dots

В § 3 своего сообщения Шредингер выводит соотношения коммутации (8.3.17) и обосновывает правила дифференцирования операторных выражений. Правила коммутации непосредственно вытекают из операторного равенства (4.1). В самом деле, применим оператор (4.1) к функции $u_k(q)$, помножим слева на $u_i(q)$ и проинтегрируем по всем dq ; тогда получим

$$\int u_i (\hat{p}_l q_l - q_l \hat{p}_l) u_k dq = (h/2\pi i) \int u_i u_k dq,$$

или

$$(\hat{p}_l q_l)_{ik} - (q_l \hat{p}_l)_{ik} = (h/2\pi i) \delta_{ik}, \quad (4.9)$$

что для каждого l совпадает с (8.3.48).

Далее Шредингер выводит два операторных равенства:

$$(h/2\pi i) \partial \hat{\mathcal{F}} / \partial q_l = \hat{p}_l \hat{\mathcal{F}} - \hat{\mathcal{F}} \hat{p}_l, \quad (h/2\pi i) \partial \hat{\mathcal{F}} / \partial p_l = \hat{\mathcal{F}} q_l - q_l \hat{\mathcal{F}}. \quad (4.10)$$

Он указывает, что эти соотношения мог бы и не выводить, поскольку они уже были получены в матричной механике.

Докажем, например, первое из этих выражений. При применении операции $\partial / \partial q_l$ в первом слагаемом правой части равенства она будет действовать не только на величины q_l , содержащиеся в $\hat{\mathcal{F}}$, но и на q_l , содержащиеся в той функции u , на которую действует оператор; последнее, однако, не предусмотрено выражением левой части, поэтому мы должны исправить это, вычтя из $\hat{p}_l \hat{\mathcal{F}}$ слагаемое $\hat{\mathcal{F}} \hat{p}_l$, соответствующее действию $\partial / \partial q_l$ на функцию u . Аналогично может быть доказано и второе равенство в (4.10).

Мы показали, что если заменить обобщенные импульсы p_l на операторы $\hat{p}_l = (h/2\pi i) \partial / \partial q_l$, то выполняются соотношения коммутации (4.9). Теперь мы докажем, что «уравнения движения» матричной механики удовлетворяются, если имеет место волновое уравнение (4.4); тем самым будет показана эквивалентность волновой механики Шредингера и матричной механики Гейзенберга.

Запишем «уравнения движения» матричной механики в форме уравнений Гамильтона. Так как они имеют одинаковую форму для всех канонических переменных, т. е. не зависят от индекса l , то мы не будем писать его; тогда

$$(\partial \hat{q} / \partial t)_{ik} = (\partial \hat{\mathcal{H}} / \partial \hat{p})_{ik}, \quad (d \hat{p} / dt)_{ik} = (-\partial \hat{\mathcal{H}} / \partial \hat{q})_{ik}. \quad (4.11)$$

Из матричной механики известно, что матричные элементы q_{ik} и p_{ik} гармонически зависят от времени, т. е. пропорциональны

$\exp [2\pi i (v_i - v_k) t]$, где v_i и v_k — частоты, соответствующие энергетическим термам системы: $E_i = h v_i$ и $E_k = h v_k$. Очевидно, что $\dot{q}_{ik} = 2\pi i (v_i - v_k) q_{ik}$ и $\dot{p}_{ik} = 2\pi i (v_i - v_k) p_{ik}$, поэтому уравнения (4.11) приобретают вид

$$\begin{aligned} (v_i - v_k) q_{ik} &= (1/h) [(\mathcal{H}q)_{ik} - (q\mathcal{H})_{ik}], \\ (v_i - v_k) p_{ik} &= (1/h) [(\mathcal{H}p)_{ik} - (p\mathcal{H})_{ik}], \end{aligned} \quad (4.12)$$

где мы для правых частей уравнений (4.11) воспользовались соотношениями (4.10).

Покажем теперь, что уравнения (4.12) удовлетворяются, если выполняется волновое уравнение (4.4), т. е. если в качестве системы ортонормированных функций u_1, u_2, \dots для построения матричных элементов взять собственные функции волнового уравнения; пусть

$$\mathcal{H}u_i = E_i u_i, \quad (4.13)$$

где \mathcal{H} — оператор Гамильтона, входящий в уравнение (4.12), а E_i — энергия стационарного i -го состояния системы. Правая часть первого уравнения (4.12) равна

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}q)_{ik} - (q\mathcal{H})_{ik} &= \sum_r \mathcal{H}_{ir} q_{rk} - \sum_r q_{ir} \mathcal{H}_{rk} = \\ &= \sum_r \int u_i \mathcal{H} u_r dq q_{rk} - \sum_r q_{ir} \int u_r \mathcal{H} u_k dq = \\ &= \sum_r E_r \delta_{ir} q_{rk} - \sum_r q_{ir} E_k \delta_{rk} = (E_i - E_k) q_{ik}. \end{aligned}$$

Теперь для первого уравнения (4.12) получим

$$(v_i - v_k) q_{ik} = (1/h) (E_i - E_k) q_{ik},$$

откуда следует $E_i = h v_i$ и $E_k = h v_k$, как и должно быть. Второе уравнение (4.12) дает тот же результат.

Этой работой Шредингер заложил основы того, что сейчас называют теорией представлений в квантовой механике.

Далее Шредингер вновь выводит уравнение из вариационного принципа, но не для атома водорода, как он это сделал в первой статье, а в общем случае консервативной механической системы.

Наконец, в § 5, последнем параграфе этого сообщения, он занимается сравнением матричной механики с волновой. И хотя Шредингер обосновывает их эквивалентность, невольное предпочтение он отдает волновому аспекту. В частности, потому, что в нем может быть прослежен непрерывный переход от микро- к макромеханике (см. «Линейный гармоничный осциллятор», п. 3), а также потому, что таким образом удается описать взаимодействие света с атомом. Сейчас мы знаем, что такое полуклассическое описание имеет ограниченную ценность, так как в строгой дираковской квантовой электродинамике необходимо квантовать и электромагнитное поле.

5. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ШТАРК-ЭФФЕКТ ЛИНИЙ БАЛЬМЕРА

В своей третьей статье [76, с. 85] Шредингер отмечает, что при малом отклонении коэффициентов волнового уравнения (4.4) от тех значений, для которых известны собственные значения и собственные функции, решение может быть получено по теории возмущений. Развиваемая Шредингером в первой части этой статьи теория возмущений, по сути дела, не отличается от метода, предложенного лордом Рэлеем для исследования колебаний струны с распределенными малыми неоднородностями [81]. Применение теории возмущений существенно основано на предположении о непрерывном характере поправок к собственным значениям и собственным функциям, связанным с отклонением коэффициентов уравнения от невозмущенных значений.

В § 1 Шредингер рассматривает теорию возмущений для обыкновенного дифференциального уравнения. На самом деле, полученные результаты применимы во всех случаях, когда невозмущенное собственное значение невырождено. Правда, следует учесть, что в квантовой механике доказывалось, что в случае одномерного движения, когда уравнение Шредингера превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение, все собственные значения невырождены.

В § 2 Шредингер рассматривает невозмущенное n -кратно вырожденное собственное значение. Теория возмущений приводит в этом случае к алгебраическому уравнению n -й степени, корни которого определяют расщепление невозмущенного уровня.

Мы не излагаем этот материал не только потому, что он сейчас более просто рассмотрен во всех курсах квантовой механики, но и потому, что ко времени написания Шредингером статьи теория возмущений уже была обстоятельно изложена в курсах математической физики. Сам Шредингер близко придерживался книги Р. Куранта и Д. Гильберта [81].

Во второй части статьи рассматривается применение изложенной выше теории возмущений к эффекту Штарка для атомов водорода, т. е. к вопросу о влиянии электрического поля на линии Бальмера.

Еще в рамках старой квантовой теории Бора — Зоммерфельда Эйнштейн получил формулу для смещения линий Бальмера в электрическом поле, хорошо совпадавшую с опытом. В § 3 Шредингер преобразует волновое уравнение к параболическим координатам, которое и при наличии электрического поля распадается на три независимых дифференциальных уравнения. Применяя теорию возмущений, развитую в § 1, Шредингер, после довольно громоздких вычислений, получает формулу Эпштейна.

В § 4 Шредингер вычисляет матричные элементы переходов и сопоставляет им интенсивности и поляризации смещенных линий Бальмера. Он отмечает: «Эти рассмотрения, конечно, не более, чем «перевод» на язык новой теории хорошо известного рассмотрения Бора для интенсивности линий, основанного на принципе соответствия».

Наконец, в § 5 Шредингер решает ту же задачу о штарк-эффекте атома водорода в полярных координатах; в этом случае переменные из-за наличия электрического поля не разделяются и надо в явном виде учесть вырождение, приводящее к секулярному уравнению. И этим методом Шредингер тоже получает формулу Эпштейна.

6. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ В НЕСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ И ПРИ НАЛИЧИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

В четвертой, последней статье [76], из числа отмеченных перед разделом 1, Шредингер в § 1 обосновывает волновое уравнение для нестационарных состояний.

Подставляя (2.19) в (2.25), получим

$$\nabla^2 \psi - [2(E - V)/E^2] \partial^2 \psi / \partial t^2 = 0. \quad (6.1)$$

Шредингер справедливо замечает, что это уравнение и уравнение (2.26)

$$\nabla^2 \psi + (8\pi^2/h^2)(E - V)\psi = 0, \quad (6.2)$$

по сути дела, эквивалентны, так как оба справедливы только при постоянной энергии E . В самом деле, E в (2.19) — постоянная интегрирования.

В том случае, когда система неконсервативна (например, V — явная функция времени), волновая функция не будет зависеть от времени гармонически, и возникает вопрос, какому уравнению она удовлетворяет. Очевидно, что вывести из стационарного волнового уравнения (6.1) или (6.2) нестационарное невозможно. Можно только «угадать» его. Шредингер правильно считает, что оно может быть получено, если из (6.2) исключить энергию E . Предположим, что волновая функция ψ зависит от E гармонически, т. е. пропорциональна вещественной части выражения:

$$\psi \sim \operatorname{Re}(e^{\pm 2\pi i E t / h}). \quad (6.3)$$

Дифференцируя это выражение по времени, получим

$$\partial^2 \psi / \partial t^2 = - (4\pi^2 E^2 / h^2) \psi. \quad (6.4)$$

Запишем (6.2) в виде

$$[\nabla^2 - (2\pi^2/h^2)V]\psi = - (8\pi^2/h^2)E\psi.$$

Приравнявая операторы, действующие на ψ в левой и правой части, возведя их в квадрат и исключая E^2 посредством (6.4), получим

$$[\nabla^2 - (8\pi^2/h^2)V]^2 \psi + (16\pi^2/h^4)\partial^2 \psi / \partial t^2 = 0. \quad (6.5)$$

Далее Шредингер пишет: «Этому уравнению удовлетворяет любое ψ с произвольным E , которое зависит от времени согласно (6.3), следовательно, и любое ψ , которое может быть разложено по времени в ряд Фурье (конечно, с коэффициентами, зависящими

от координат). Поэтому уравнение (6.5) — единое и общее волновое уравнение для полевого скаляра ψ .

Уравнение (6.5) — это уравнение второго порядка по времени и четвертого по координатам. С современной точки зрения мы должны от него отказаться уже потому, что оно содержит вторую производную $\partial^2\psi/\partial t^2$. В самом деле, мы считаем, что в квантовой механике состояние системы полностью определяется волновой функцией; в частности, эволюция системы — начальным значением функции ψ ; но тогда уравнение для ψ должно содержать первую производную $\partial\psi/\partial t$.

Шредингера тоже не удовлетворяет уравнение (6.5). Он пишет: «Нет необходимости превращать волновое уравнение в дифференциальное уравнение четвертого порядка (по координатам — А. А.) при исключении параметра энергии». Для следующей из (6.3) временной зависимости ψ можно воспользоваться не (6.4), а равенством

$$\partial\psi/\partial t = \pm (2\pi i/h) E\psi. \quad (6.6)$$

Следует отметить, что (6.6) имеет место, только если ψ комплексно, т. е. пропорционально самой экспоненте (6.3). Подставляя теперь энергию E из (6.6) в (6.2), получим следующее волновое уравнение:

$$\nabla^2\psi - (8\pi^2/h^2)V\psi \mp (4\pi i/h)\partial\psi/\partial t = 0. \quad (6.7)$$

Шредингер не может принять для ψ комплексных значений. Он пишет: «Мы потребуем, чтобы комплексная волновая функция ψ удовлетворяла одному из уравнений (6.7). Так как комплексно-сопряженная ψ^* удовлетворяет тогда другому из уравнений (6.7), то, если понадобится вещественная волновая функция, можно для нее взять вещественную часть ψ ».

Сейчас мы знаем, что в (6.3) достаточно у показателя экспоненты взять один знак; обычно принимают знак минус (нижний). В этом случае в (6.7) тоже остается один нижний знак (плюс). Уравнение (6.7) приобретает вид

$$(i\hbar/2\pi)\partial\psi/\partial t = [-(\hbar^2/8\pi^2)\nabla^2 + V]\psi. \quad (6.8)$$

Это правильное нестационарное уравнение Шредингера определяет истинные комплексные волновые функции ψ . Сейчас мы говорим, что из (6.6) следует, что энергии E соответствует оператор $(i\hbar/2\pi)\partial/\partial t$, поэтому из (4.4) следует волновое уравнение

$$(i\hbar/2\pi)\partial\psi/\partial t = \mathcal{H}\psi, \quad (6.8a)$$

которое совпадает с (6.8). Конечно, в стационарном случае отсюда следует (4.4).

В § 2 Шредингер рассматривает теорию дисперсии. Для этого он распространяет теорию возмущений на случай, когда переменное электромагнитное поле частоты ν зависит от времени. При этом необходимо, конечно, воспользоваться нестационарным волновым уравнением (6.8).

Используя малость возмущающего члена $A(x) \cos 2\pi\nu t$, можно получить выражение для волновой функции ψ_k , содержащее добавочное слагаемое, равное

$$(1/2) \sum_{n=1}^{\infty} a'_{kn} u_n(x) \{ [e^{(2\pi i t/h)(E_k+h\nu)} / (E_k - E_n + h\nu)] + [e^{(2\pi i t/h)(E_k-h\nu)} / (E_k - E_n - h\nu)] \}, \quad (6.9)$$

где

$$a'_{kn} = \int A(x) u_k(x) u_n(x) dx, \quad (6.9a)$$

а $u_k(x)$ — амплитуда волновой функции начального k -го состояния атома (аналогично $u_n(x)$) *).

Если амплитуда электрического поля переменной электромагнитной волны, поляризованной вдоль оси z , равна A_0 , то $A(x) = A_0 \sum e_i z_i = -A_0 M_z$, где M_z — дипольный момент атома вдоль оси z . Шредингер вычисляет средний электрический момент атома вдоль направления y^{**}) и получает

$$\int M_y \psi \psi^* dx = \int \sum e_i y_i \psi \psi^* dx = a_{kk} + 2A_0 \cos 2\pi\nu t \sum_{n=1}^{\infty} (E_n - E_k) a_{kn} b_{kn} / (E_k - E_n)^2 - h^2\nu^2, \quad (6.10)$$

где

$$a_{kn} = \int M_z u_k(x) u_n(x) dx, \quad b_{kn} = \int M_y u_k(x) u_n(x) dx. \quad (6.10a)$$

Второе слагаемое в (6.10), пропорциональное $A_0 \cos 2\pi\nu t$, обнаруживает большое сходство с соответствующим членом в формулах дисперсии (см. гл. VIII, раздел 1). Это не удивительно, так как второе слагаемое в (6.10), так же как и соответствующий член в формулах дисперсии, обусловлены поляризацией атомов под действием первичного излучения. Шредингер пишет: «Эта часть выглядит весьма разумной и удовлетворяет всем требованиям, которые мы привыкли предъявлять к «дисперсионной формуле». Особо отметим появление в (6.10) так называемых «отрицательных» членов, которым в обычной интерпретации соответствуют вероятности перехода на более глубокие уровни ($E_n < E_k$). На эти члены, используя соображения принципа соответствия, впервые обратил внимание Крамерс (см. (8.1.12) — *A. A.*). Вообще наша формула, несмотря на совсем отличный подход, формально, по-видимому, идентична с крамеровской формулой для вторичного излучения».

В §§ 3—5 рассматриваются следующие вопросы: возбужденные атомы, вырожденные системы, сплошной спектр, резонанс, обобщение на произвольное возмущение. Мы остановимся только

*) Здесь x — набор всех координат электронов атома.

**) Направление y произвольно по отношению к направлению x .

на § 6, посвященном релятивистски-магнитному обобщению волнового уравнения.

Шредингер обращает внимание на то, что волновое уравнение (6.7) может быть получено посредством следующей формальной процедуры. Заменяем в уравнении Гамильтона — Якоби (2.16) величины $\partial S/\partial t$ и $\partial S/\partial q_i$ на операторы $\pm (h/2\pi i) \partial/\partial t$ и $\pm (h/2\pi i) \partial/\partial q_i$, и применим полученное выражение к функции ψ ; в результате мы найдем волновое уравнение (6.7).

Для учёта релятивизма и магнитного поля Шредингер поступает аналогично.

Для электрона с зарядом $-e$ и массой m в магнитном поле напряженности $H = \text{rot } A$ и электрическом поле напряженности $E = -\text{grad } \varphi - (1/c) \partial A/\partial t$ (φ , A — электромагнитные потенциалы) релятивистское уравнение Гамильтона — Якоби имеет вид [45, § 16]

$$(1/c^2) (\partial S/\partial t - e\varphi)^2 - [\text{grad } S + (e/c) A]^2 - m^2 c^2 = 0. \quad (6.11)$$

Возведя скобки в квадрат и сопоставляя величинам $\partial S/\partial t$ и $\text{grad } S$ соответствующие операторы, получим следующее волновое уравнение:

$$\nabla^2 \psi - (1/c^2) \partial^2 \psi / \partial t^2 \pm (4\pi e/hc) [(\varphi/c) \partial \psi / \partial t + A \text{ grad } \psi] \mp + (4\pi^2 e^2/h^2 c^2) (\varphi^2 - A^2 - m^2 c^4/e^2) \psi = 0. \quad (6.12)$$

Хотя последнее равенство формально — два уравнения (одно со знаком плюс, другое со знаком минус), фактически достаточно решить одно из них, так как если ψ — решение одного из них, то ψ^* — решение другого.

Для атома водорода в отсутствие внешних полей из уравнения (6.12) вытекает решение Зоммерфельда для тонкой структуры с расщеплением, вдвое меньшим наблюдаемого на опыте. Шредингер проницательно указывает, что необходимо дополнительно учесть спин электрона, введенный Гаудсмитом и Уленбеком. Если пренебречь в уравнении (6.12) членом A^2 , то мы придем к уравнению, описывающему нормальный эффект Зеемана.

Неудовлетворительным является то, что уравнение (6.12) содержит член $(1/c^2) \partial^2 \psi / \partial t^2$, т. е. второго порядка по времени. Это означает, что состояние квантовой системы определяется не только начальным значением ψ , но и $\partial \psi / \partial t$, что является неудовлетворительным.

Правильное релятивистское уравнение для электрона, открытое Дираком в 1928 г., содержит только первую производную от волновой функции по времени и автоматически дает спин электрона.

В § 7, последнем параграфе этого сообщения, Шредингер вновь обсуждает физический смысл волновой функции. Так как он по-прежнему отождествляет волновые пакеты из ψ -функций с распределенным электрическим зарядом, что, как известно, неверно, то мы не будем останавливаться на этом материале.

7. КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА

В феврале 1928 г. одновременно и независимо индийские физики И. Раман и К. С. Кришнан в Калькутте и советские физики Г. С. Ландсберг и Л. И. Мандельштам в Москве открыли новое явление при рассеянии света. Раман и Кришнан наблюдали это явление при рассеянии света в жидкостях и газах, а Ландсберг и Мандельштам — при рассеянии в кристаллах кварца. Это явление советские физики называют комбинационным рассеянием, а зарубежные — эффектом Рамана. К моменту публикации предварительного сообщения Ландсберга и Мандельштама [82] Раман и Кришнан опубликовали три кратких письма в журнале «Nature» [83].

Мы кратко остановимся на цитированной выше работе Ландсберга и Мандельштама.

Авторы пишут: «При изучении молекулярного рассеяния света в твердых телах, предпринятого нами для выяснения вопроса, имеет ли при этом место изменение длины волны, предполагать которое позволяет дебаевская теория теплоемкости*), нами было открыто явление, представляющее значительный теоретический интерес. Явление это заключается в изменении длины волны рассеянного света, однако значительно больше, имеющим иной характер и иное происхождение, чем то, которое мы искали».

Так как была необходимость пользоваться монохроматическим светом, то источником служила ртутная кварцевая лампа. Все исследование велось в ультрафиолетовом диапазоне, поскольку короткие волны рассеиваются существенно сильнее длинных. Свет, рассеянный под прямым углом к падающему лучу, фотографировался с помощью кварцевого спектрографа. В работе приводится одна из типичных спектрограмм, причем указывается, что на репродукции видны лишь наиболее интенсивные спутники наиболее ярких линий.

Далее авторы пишут: «... совершенно неожиданно обнаружилось, что все линии ртути сопровождаются спутниками, расположение которых вполне закономерно повторяется вблизи каждой линии. Один из этих спутников, наиболее ярко выраженный, расположен в части, соответствующей большей длине волны; второй, менее интенсивный, также смещен в красную сторону спектра, но менее значительно, чем первый; наконец, еще два спутника окаймляют по обе стороны основную линию, располагаясь в непосредственной близости к ней... В обоих исследованных образцах кварца вся система спутников приходится в точности на одни и те же места: спектры совпадают при наложении».

Контрольные опыты показали реальность существования спутников.

*) Изменение длины волны света, рассеянного на дебаевских волнах, было теоретически предсказано Л. И. Мандельштамом и независимо Л. Бриллюэном; экспериментально оно было открыто советским физиком Е. Ф. Гроссом.

Авторы дают совершенно правильное объяснение явлению, связывая длинноволновые спутники с фотонами, потерявшими часть энергии на возбуждение оптических колебаний кристалла. Выбирая собственные колебания кварца, соответствующие длине волны $\lambda = 20,75$ мкм, они получают правильные по порядку величины смещения для спутников.

Раман и Кришнан, исследуя рассеяние света в жидкостях и газах, пришли, в общем, к аналогичным результатам. В качестве источника света они использовали солнечные лучи, сфокусированные объективом телескопа. Для выделения монохроматических линий они применяли светофильтры.

Любопытно отметить, что комбинационное рассеяние света было теоретически предсказано А. Смекалем еще в 1923 г. [84]. Его рассуждения сводились к следующему: если E — энергия возбуждения молекулы (собственная частота колебаний кристалла), то рассеиваемый фотон частоты ν путем обмена энергией с нормальными и возбужденными молекулами может превратиться в фотон частоты $\nu - E/h$ или $\nu + E/h$; при этом интенсивность спутника с частотой $\nu + E/h$ во столько раз меньше интенсивности спутника с частотой $\nu - E/h$, во сколько раз число возбужденных молекул меньше нормальных, а именно в $\exp(-E/kT)$ раз. Однако физики, открывшие комбинационное рассеяние, не руководствовались идеей Смекаля.

Огромное значение комбинационного рассеяния заключается в том, что его исследование позволяет определить частоты собственных колебаний молекул (E/h), которые другим способом определить весьма трудно или просто невозможно.

ФИЗИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. ВЕРОЯТНОСТНОЕ ТОЛКОВАНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Идея вероятностного толкования волновой функции принадлежит Макс Бурну. Эту идею он высказал в статье «Квантовая механика процессов соударения» [85] *).

Строго говоря, вероятностному толкованию волновой функции в этой обширной работе посвящено едва ли две страницы; в остальной части статьи рассматриваются аperiodические системы и квантовая теория столкновений. Показано, что статистическая интерпретация волновой функции ведет к теории столкновений, в которой вероятности переходов определяются асимптотическим поведением аperiodических решений.

Борн указывает, что в матричной форме квантовой механики, открытой Гейзенбергом и развитой Гейзенбергом, Йорданом и Борном, вообще отказываются от точного описания атомных процессов в пространстве и времени. В ней устанавливают соотношения только между наблюдаемыми величинами: энергетическими термами, амплитудами вероятностей перехода; другими словами, ничего нельзя сказать о движении электронов в атомах. Шредингер, с другой стороны, строит ограниченные во всех трех измерениях волновые пакеты и отождествляет их с микрочастицами.

Обе точки зрения представляются Борну неудовлетворительными, и он выдвигает новую точку зрения, которая может быть интерпретирована посредством квантовой теории столкновений. Борн указывает, что он исходит из идеи Эйнштейна, согласно которой волновое поле является некоторым «призрачным полем» для квантов света — фотонов. Борн предлагает дебройлевские волны, описываемые уравнением Шредингера, считать некоторым «призрачным» или, может быть, лучше сказать «ведущим полем» для микрочастиц. Согласно этой точке зрения, квадрат модуля волновой функции, т. е. $|\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t)|^2$, определяет относительную плотность вероятности присутствия микрочастиц в пространстве, т. е. $|\psi|^2 d\tau$ — вероятность частицам находиться в момент времени t в объеме $d\tau = dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_N dy_N dz_N$.

Борн пишет, что он хотел бы в качестве возможного предположения высказать следующую идею: «Ведущее поле, представленное посредством некоторой скалярной функции ψ от координат

*) Предварительное сообщение о работе было опубликовано в журнале Z. Phys., 1926, Bd 37, S. 863.

нат всех частиц и времени, распространяется согласно дифференциальному уравнению Шредингера. Однако импульс и энергия переносятся так, как будто бы на самом деле двигались микрочастицы. Траектории этих микрочастиц определены только в той мере, в какой они ограничены законами сохранения энергии и импульса; в остальном их выбор определяется только вероятностью, обусловленной значениями функции ψ . Это, может быть, можно выразить несколько парадоксально так: движение микрочастиц следует законам вероятности, сама же вероятность распространяется в согласии с законом причинности».

Далее, в §§ 2—8 Борн рассматривает в первом приближении теории возмущений квантовой механики упругое рассеяние частиц на силовом центре. Результаты, полученные им, широко известны сейчас как борновское приближение в квантовой теории рассеяния. Они излагаются более компактно и просто почти во всех учебниках по квантовой механике (см., например, [56, § 78]). Следует отметить, что этот материал не дает каких-либо доказательств вероятностной интерпретации волновой функции; он только показывает непротиворечивость такого толкования.

Наиболее прямое подтверждение волновых свойств отдельных микрочастиц дает опыт Бибермана, Сушкина и Фабриканта [86], в котором промежуток времени, разделяющий прохождение отдельных электронов через дифракционный прибор, в тысячи раз больше времени движения электрона внутри прибора. Если опыт при этом длится достаточно долго, то получается отчетливая картина дифракции, свидетельствующая о вероятностном характере волновой функции.

Эйнштейн, признавая эвристическую ценность статистического толкования ψ -функции, считал, что более совершенная теория атомных процессов приведет к их казуальному описанию.

В заключение Борн пишет: «На основании изложенных выше соображений, я хотел бы отметить, что квантовая механика позволяет сформулировать и решать не только системы в стационарном состоянии, но и процессы перехода. Шредингеровская форма квантовой механики представляется для этого наиболее подходящей; она позволяет сохранить обычные представления о пространстве и времени, в которых события развиваются нормально. В то же время из развитой выше теории не следует казуальной последовательности отдельных микропроцессов. В моем предварительном сообщении я особенно подчеркнул этот индетерминизм, так как он мне кажется соответствующим практике экспериментаторов. Однако, конечно, каждому, кто не хочет этим довольствоваться, не возбраняется принять в теории другие скрытые параметры, которые определяют отдельные микропроцессы». По этому поводу следует отметить, что впоследствии И. фон Нейманом [87] было показано, что существование таких скрытых параметров находится в противоречии с общими положениями квантовой механики.

2. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Существенный шаг в интерпретации квантовой механики был сделан Гейзенбергом при формулировке им соотношений неопределенностей [88]. Соотношения неопределенностей в некотором смысле объяснили статистическую сущность квантовой механики. Обширная статья Гейзенберга не во всех своих частях ясна и убедительна. Но установление самих соотношений неопределенностей является его несомненной заслугой, поэтому мы с полным основанием называем их соотношениями неопределенностей Гейзенберга.

Гейзенберг указывает, что прогресс в квантовой механике был связан с отказом от таких понятий, как траектория электрона в атоме и частота его обращения. Возникает естественный вопрос, в какой мере можно пользоваться в квантовой механике такими понятиями, как положение (координата) электрона, его скорость (импульс) и тому подобное.

В результате анализа некоторых мысленных экспериментов Гейзенберг пришел к выводу: «Все понятия классической теории, которые служат для описания механической системы, можно определить и для атомных процессов. Однако эксперименты, дающие такие определения, вносят некоторую неопределенность в тех случаях, когда мы одновременно хотим определить пару канонически сопряженных механических величин».

Таковыми величинами являются, например, координата q и сопряженный ей импульс p . Определение координаты электрона Гейзенберг связывает с «освещением» его рентгеновским (или γ -) излучением. Из волновой оптики известно, что неопределенность положения освещаемого объекта порядка длины волны используемого излучения: $\Delta q \approx \lambda$. Таким образом, при использовании достаточно коротких длин волн положение (координата) электрона может быть определено с любой степенью точности. Однако при этом (и это принципиально важно!) квант излучения испытывает на электроны комptonовское рассеяние, что ведет к скачкообразному изменению его импульса.

Гейзенберг считает, что это скачкообразное изменение импульса электрона равно неопределенности его значения. Из формулы (1.3.11) или (1.3.11a) мы видим, что по порядку величины $\Delta p \approx \approx mv$; таким образом,

$$h\nu/c = h/\lambda \approx h/\Delta q \approx mv \approx \Delta p,$$

или

$$\Delta q \Delta p \approx h. \quad (2.1)$$

Выражение (2.1) называют соотношением неопределенностей для координаты и импульса. Очень важно отметить принципиальный характер (2.1), вообще не позволяющий в квантовой механике задавать q и p с точностью, превышающей (2.1). В связи с этим становится понятным деление фазового пространства одноатомного газа на ячейки объема h^3 . Можно придумывать другие опыты для

определения q или p (это на самом деле и делалось), но соотношение (2.1) оставалось неизменным. Отказ от (2.1) есть одновременно отказ от квантовой механики.

Известно, что Бор был не вполне доволен работой Гейзенберга. Это нашло свое отражение в «Примечании при корректуре», где Гейзенберг пишет: «После завершения этой работы новые исследования Бора привели к точкам зрения, которые существенно углубили и уточнили изложенный в работе анализ допустимых квантово-механических связей. В связи с этим Бор обратил мое внимание на то, что я в некоторых рассуждениях не учел ряд важных особенностей. В первую очередь то, что неопределенности механических величин, возникающие при наблюдении, обусловлены не столько скачком, испытываемым соответствующей величиной, сколько требованием удовлетворять различным сторонам явления — корпускулярной и волновой».

Бор описал ситуацию, связанную с изменением положения электрона, посредством «гамма-микроскопа» (физический конгресс в Комо, сентябрь 1927 г.). На рис. 10 AA — объектив микроскопа, BB — фокальная плоскость [79]; разрешающая сила микроскопа приблизительно равна отношению $\lambda/\sin\alpha$; при рассеянии фотона в микроскоп его импульс в фокальной плоскости может измениться на величину

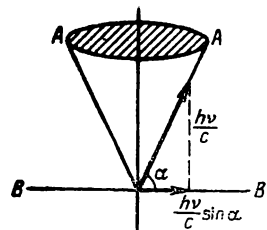


Рис. 10

$$(hv/c) \cos(\pi/2 - \alpha) = (h/\lambda) \sin \alpha.$$

Таким образом, $\Delta q \approx \lambda/\sin \alpha$ и $\Delta p \approx (h/\lambda) \sin \alpha$, в результате мы приходим к тому же соотношению (2.1).

Так же, как нельзя говорить об измерении частоты периодического процесса в определенный момент времени, нельзя говорить и об измерении энергии атома в некоторый момент времени. Конечно, в стационарном состоянии атом обладает вполне определенной энергией, но для ее измерения имеется практически неограниченный промежуток времени. Гейзенберг рассматривает процесс измерения энергии атома в опыте Штерна — Герлаха (см. гл. V, раздел 3). Мы покажем, что погрешность измерения энергии атома в этом опыте тем больше, чем короче промежуток времени, в течение которого атом подвергается действию отклоняющей силы (заметим, что эта погрешность измерения энергии ΔE должна быть много меньше разности энергий стационарных состояний атома).

Если ΔE — погрешность измерения энергии в опыте Штерна — Герлаха, то ей соответствует средняя сила отклонения порядка $\Delta E/d$, где d — ширина пучка, определяемая размерами диафрагмы. Если Δt — время измерения энергии, то $p/\Delta t$ — эффективная сила, определяющая поток частиц, движущихся с импульсом p вдоль оси прибора. Малый угол отклонения частиц от оси будет равен $(\Delta E/d) : (p/\Delta t) = \Delta E \Delta t / pd$. Пока наши оценки основывались на

корпускулярных свойствах частиц; теперь учтем волновой аспект явления. Очевидно, для отклонения $\Delta E \Delta t / pd$ необходимо, чтобы оно было больше дифракционного отклонения на щели ширины d , т. е. больше λ/d , где длина волны $\lambda = h/p$. Отсюда имеем $\Delta E \Delta t / pd \gtrsim \lambda/d = h/pd$, или

$$\Delta E \Delta t \gtrsim h. \quad (2.2)$$

Это соотношение называют соотношением неопределенностей для энергии и времени. Несмотря на формальное сходство (2.2) с (2.1), они, по сути дела, весьма различны; физический смысл (2.2) продолжает подвергаться обсуждению [89]. В частности, для квазистационарного состояния, когда система «распадается» за среднее время τ , которое очень велико по сравнению с обратными значениями характерных внутренних частот системы (радиоактивное атомное ядро, возбужденное состояние атома), $\Delta t \approx \tau$, $\Delta E \approx \Gamma$ — ширине квазистационарного уровня энергии.

Выражение (2.2) выводится совсем просто для свободной частицы, если под Δt понимать неопределенность во времени фиксации частицы, а под ΔE — неопределенность ее энергии. Плоская монохроматическая волна $\exp 2\pi i(kx - \nu t)$ представляет частицу, движущуюся параллельно оси x с импульсом $p = h/\lambda = \hbar k$ ($k = 1/\lambda$ волновое число) и энергией $E = \hbar \nu$. С помощью суперпозиции таких волн, слегка отличающихся по волновому числу k и частоте ν , можно построить волновой пакет протяженностью Δx , который проходит данную точку пространства за время $\Delta t = \Delta x/v$, где v — групповая скорость пакета, совпадающая со скоростью частицы (7.1.7).

Очевидно, что такой волновой пакет, характеризующийся размазанностью по импульсам $p = \hbar k$, дает неопределенность в энергии $\Delta E \approx (\partial E / \partial p) \Delta p = v \Delta p$. Таким образом,

$$\Delta E \Delta t \approx v \Delta p (\Delta x/v) = \Delta p \Delta x \approx h,$$

как это следует из (2.1).

Гейзенберг замечает, что в аппарате квантовой механики соотношениям неопределенностей (2.1) соответствуют перестановочные соотношения (8.3.17) $pq - qp = (1/2\pi i) \cdot 1$. Далее, используя теорию преобразований Дирака — Иордана, Гейзенберг показывает, как из них получают соотношение неопределенностей (2.1).

Мы не касаемся целого ряда других обсуждений в обширной статье Гейзенберга, потому что, как нам кажется, они не вызвали большого интереса, сравнимого с фундаментальным результатом, выражающимся в соотношениях (2.1) и (2.2). Мы приведем только высказывание Гейзенберга, связанное с обсуждением закона причинности: «В строгой формулировке закона причинности, — если нам точно известно начальное состояние системы, то можно однозначно определить ее будущее состояние, — следует отказаться не от следствия, а от посылки. Мы не можем принципиально знать точно начальное состояние». Конечно, нарушение закона причинности в квантовой области имеет место только по отноше-

нию к классической механической причинности (детерминизму Лапласа).

Сложившуюся к этому времени в квантовой теории ситуацию Паули [110, с. 7] характеризует следующими словами:

«Открытие волн материи де Бройлем (см. гл. VII, раздел 1 — А. А.), матричной механики Гейзенбергом (см. гл. VIII, раздел 2 — А. А.) и общее волново-механическое дифференциальное уравнение Шредингера (см. гл. IX, раздел 1 — А. А.), позволившее установить связь между этими воззрениями (см. гл. IX, раздел 4 — А. А.), произвели последний решающий поворот в квантовой теории. Принцип неопределенностей Гейзенберга и примыкающие к нему принципиальные пояснения Бора (см. гл. X, раздел 2 — А. А.) завершили предварительное построение основ этой теории.

Эти основы непосредственно связаны с двойственной (корпускулярной и волновой) природой света и материи и приводят к давно (но тщетно) искавшемуся решению задачи непротиворечивого и полного описания относящихся сюда явлений. Это решение приобретает цену отказа от *однозначной объективируемости* (Objektivierbarkeit) процессов природы, т. е. от классического пространственно-временного и причинного описания природы, которое существенным образом покоится на однозначной разделимости явления и средств его наблюдения».

3. ДИСКУССИИ МЕЖДУ ЭЙНШТЕЙНОМ И БОРОМ О ПРОБЛЕМАХ ТЕОРИИ ПОЗНАНИЯ В АТОМНОЙ ФИЗИКЕ

Обширная статья под этим названием была опубликована Бором в книге, посвященной 70-летию Эйнштейна [90] (рус. пер. [91]).

Дискуссии Эйнштейна с Бором по гносеологическим вопросам атомной теории сыграли большую роль в установлении правильной интерпретации понятий и законов квантовой механики.

Вот как сам Бор пишет об этом: «Главным предметом нашего спора с самого начала был вопрос о том, какую позицию следует занять по отношению к тем отклонениям от привычных принципов описания природы, которые характерны для новейшего развития физики. Я имею в виду тот путь, на который вступила физика в первом году нашего века в результате открытия Планком универсального кванта действия. Это открытие выявило в законах природы черту атомистичности, которая выходит далеко за пределы старого учения об ограниченной делимости материи; действительно, это открытие показало нам, что классические теории физики являются идеализациями, которые допускают однозначное применение только в тех предельных случаях, когда все величины размерности действия велики по сравнению с квантом действия. На обсуждении стоял вопрос, следует ли рассматривать отказ от причинного описания атомных процессов, фактически содержащихся в попытках овладеть новым положением вещей, как временное пренебрежение идеалами, которые в конечном счете снова вернут

свои права, или же дело идет о необратимом шаге на пути к настоящей гармонии между анализом и синтезом физических явлений».

Далее Бор считает необходимым напомнить об огромном вкладе в квантовую теорию, внесенном самим Эйнштейном.

В чем Эйнштейн усматривал неполноту квантово-механического описания или, конкретнее, корпускулярно-волнового дуализма микрочастиц?

Рассмотрим следующий простой мысленный эксперимент. Световая волна падает на полупрозрачную пластинку. Если зеркалами свести в одну точку отраженный и прошедший лучи, то можно получить интерференционную картину, что означает, что свет одновременно как отразился от пластины, так и прошел через нее. Если заменить теперь зеркала фотопластинками, то в случае одного фотона *) он обнаружился либо на одной из них, либо на другой, что, казалось бы, свидетельствует о том, что фотон либо отразился, либо прошел сквозь пластинку.

Но так как свет не мог заранее знать, что будет поставлено на его пути — зеркало или фотопластинка, а одновременно распространяться по двум путям или по одному невозможно, то корпускулярно-волновой дуализм не описывает полностью микрочастиц.

Второй мысленный эксперимент, не удовлетворяющий Эйнштейна, заключался в следующем. Представим себе непрозрачный для электронов экран с двумя узкими параллельными щелями. Если расстояние между щелями порядка длины дебройлевской волны электронов, падающих на экран, то за экраном на фотопластинке будет наблюдаться интерференционная картина, состоящая из ряда параллельных щелям темных и светлых полос. Если уменьшить плотность электронного пучка так, чтобы сквозь щели одновременно проходило по одному электрону (аналогично опыту Бибермана, Сушкина, Фабриканта), то отдельные электроны будут попадать на фотопластинку, образуя картину, соответствующую интерференционной. Но электрон — частица, следовательно, он проходит сквозь одну из щелей; но тогда откуда он «знает» о существовании второй щели (силовое взаимодействие со второй щелью ничтожно)? И эта ситуация представлялась Эйнштейну неудовлетворительной.

Важный шаг в интерпретации квантовой механики был сделан Борном, который приписал ψ -функции характер амплитуды вероятности (см. раздел 1). Второй решающий шаг был сделан Бором, который указал, что свойства атомного объекта неотделимы от средств наблюдения (Международный конгресс в Комо, октябрь 1927 г., [92]). Конкретно это выражается в соотношении неопределенностей Гейзенберга (см. раздел 2).

Бор подчеркивал, что во всяком мысленном эксперименте надо различать средство и объект наблюдения. Средство наблюде-

*) Известный венгерский физик Л. Яноши повторил для фотонов опыт Бибермана, Сушкина, Фабриканта (см. гл. X, раздел 1) и показал, что отдельный фотон обладает волновыми свойствами [80, § 9].

ния (экспериментальная установка) должно описываться на языке классической физики. Объект наблюдения (обычно микрочастица) должен описываться на языке квантовых понятий. Полупрозрачная пластинка, зеркало, фотопластинки, экран со щелями — средства наблюдения. Фотон и электрон — объекты наблюдения.

Вот как Бор отвечал, например, по поводу второго мысленного эксперимента, рассмотренного выше: пока электрон взаимодействует с экраном, он ведет себя, как волна, и поэтому проходит одновременно через обе щели, но когда он сталкивается с фотопластинкой, он ведет себя, как частица; в этом и заключается корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Аналогично может быть истолкован и первый мысленный эксперимент.

Эта связь между свойством микрочастицы и средствами наблюдения находит свое количественное выражение в соотношении неопределенностей Гейзенберга.

Рассмотрим с этой точки зрения «гамма-микроскоп». До взаимодействия с γ -квантом электрон, движущийся по инерции, описывается бесконечной плоской волной де Бройля; его импульс точно известен: $p = h/\lambda$, но его положение в пространстве совершенно неопределенно. После взаимодействия с γ -квантом электрон локализуется в пространстве как частица с погрешностью $\Delta q = \lambda/\sin \alpha$, т. е. бесконечная волна редуцируется в волновой пакет с набором волн в интервале $\Delta \lambda = |\Delta(h/p)| \approx (h/p^2) \Delta p \approx \lambda \sin \alpha$, где мы использовали соотношение де Бройля $\lambda = h/p$ и условие отдачи импульса при столкновении: $\Delta p = (h/\lambda) \sin \alpha$.

Как отмечает Бор: «Вследствие этого данные, полученные при разных условиях опыта, не могут быть охвачены одной-единственной картиной; эти данные должны скорее рассматриваться, как дополнительные в том смысле, что только совокупность разных явлений может дать более полное представление о свойствах объекта».

На Сольвеевском конгрессе, который происходил в 1930 г., дискуссии между Эйнштейном и Бором по поводу гносеологического толкования квантовой механики достигли драматического характера. Эйнштейн, несмотря на все успехи квантовой механики, не мог примириться с вероятностным толкованием ψ -функции и следующим из него соотношением неопределенностей. Он предложил вниманию членов конгресса мысленный эксперимент, который, с его точки зрения, противоречил соотношению неопределенностей для энергии и времени (2.2). Мысленный эксперимент Эйнштейна основывался на им же открытой эквивалентности между энергией ϵ и массой m :

$$\epsilon = mc^2. \quad (3.1)$$

В качестве экспериментальной установки Эйнштейн предложил прибор, схематически изображенный на рис. 11. Далее Бор в цитированной выше статье пишет: «Он состоит из ящика с отверстием P в одной из стенок, причем отверстие можно открывать и закрывать затвором Q , приводимым в движение при помощи часово-

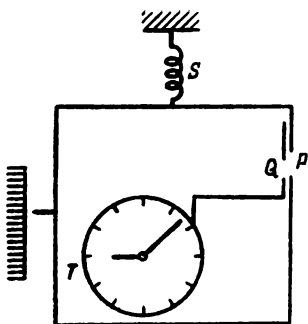


Рис. 11

го механизма T , помещенного внутри ящика. Пусть вначале ящик содержит излучение, а часы отрегулированы так, что в определенный момент их механизм открывает затвор на очень короткое время. Таким устройством можно было бы достигнуть того, что в момент времени, который будет известен с любой желаемой точностью, через отверстие пройдет один-единственный фотон. Но, кроме того, взвешивая ящик до и после этого события, казалось бы, можно измерить энергию фотона с любой желаемой точностью — в прямом противоре-

чии с квантово-механическим соотношением неопределенностей для энергии и времени.

Я вспоминаю, как Бор докладывал об этом эпизоде на семинаре в Ленинградском физико-техническом институте в середине 30-х годов. «Если бы Эйнштейн оказался прав, — сказал Бор, — то квантовая механика оказалась бы незамкнутой теорией и наша работа по ее обоснованию была бы несостоятельной».

В каком же пункте рассуждений Эйнштейн был неправ?

Замечательная интуиция Бора подсказала ему, что в данном случае надо учесть то, что взвешивание произойдет в пружинных весах S в поле силы тяжести, которая, согласно общей теории относительности, влияет на ход часов. Проницательный ум Эйнштейна не учел обстоятельства, связанного с им же открытой закономерностью.

С одной стороны, согласно соотношению неопределенностей для координаты и импульса (2.1), погрешность в силе тяжести ящика по шкале R равна $\Delta q \approx h/\Delta p$, где Δp — квантовая неопределенность импульса ящика. В результате взвешивания в поле силы тяжести в течение времени t ящик приобретает импульс, равный импульсу силы тяжести $g\Delta mt$, где g — ускорение свободного падения. Для того чтобы можно было произвести взвешивание, необходимо, чтобы

$$\Delta p \approx h/\Delta q < g\Delta mt. \quad (3.2)$$

Чем точнее выполняется отсчет q по шкале R , тем продолжительнее должно быть время взвешивания t , если нужно получить заданную погрешность Δt измерения массы ящика.

С другой стороны, согласно общей теории относительности, часы в ящике, передвинутые в поле силы тяжести на величину Δq , изменяют свой ход таким образом, что их показание на протяжении промежутка времени t меняется на величину

$$\Delta t = t g\Delta q/c^2, \quad (3.3)$$

где c — скорость света в вакууме [93]. Исключая из неравенств

(3.2) и (3.3) время взвешивания t и используя (3.1), получим

$$\Delta t > h/\Delta mc^2 = h/\Delta \varepsilon,$$

т. е.

$$\Delta t \Delta \varepsilon > h, \quad (3.4)$$

в полном соответствии с (2.2).

Выше уже было отмечено, что при обсуждении мысленных экспериментов в квантовой механике объекты наблюдения (электроны, фотоны) описываются с квантовой точки зрения, а средства наблюдения (экраны, щели) — с классической. Обычно объектами наблюдения являются микрочастицы, а средствами наблюдения — макроскопические тела. Однако в рассмотренном нами примере объектом наблюдения является макроскопический ящик, включающий в себя часы, затвор и тому подобное. Именно к этому ящику мы применяем соотношение неопределенностей $\Delta q \Delta p \approx h$. Средствами же наблюдения являются неподвижная шкала R и стойка, к которой прикреплена пружина весов S .

Разъяснения Бора не убедили Эйнштейна. «Я не верю, чтобы господь бог играл в кости», — говорил он. Эренфест, друг Эйнштейна, упрекал его в том, что его критика канонической интерпретации квантовой механики весьма похожа на критику теории относительности с точки зрения «здорового смысла».

В середине 30-х годов Эйнштейн в соавторстве с Б. Подольским и Н. Розеном нашли, как им казалось, непримиримые противоречия в интерпретации квантовой механики. Однако Бор показал, что они могут быть разрешены на основании того же принципа дополненности, который он сформулировал в 1927 г.

Эйнштейн оставался убежденным в неполноте квантовой механики до конца своей жизни, что, конечно, доставляло огорчение всем, почитавшим его гениальный вклад в физику.

НЕКОТОРЫЕ ПРИНЦИПИАЛЬНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА АТОМА ГЕЛИЯ

Рассмотрение движения двух электронов в атоме гелия методами старой квантовой механики Бора — Зоммерфельда оказалось совершенно несостоятельным.

В своей основополагающей работе 1913 г. Н. Бор рассмотрел следующую модель атома гелия: два электрона, расположенные на концах диаметра окружности, синхронно вращаются вокруг ядра. Такая модель не только не сумела объяснить сложный спектр гелия, но и в противоречии с опытом приписывала атому гелия постоянный магнитный момент, равный двум магнетонам Бора. На самом деле гелий не парамагнитен, а диамагнитен.

В 1921 г. Н. Бор и Э. Кембл одновременно предложили модель атома гелия, в которой электроны синхронно вращаются по двум круговым орбитам, наклоненным друг к другу под углом 60° . Эта модель также приводит к парамагнетизму гелия и также не объясняет особенностей спектра гелия. Кроме того, Х. Крамерс и Дж. Ван Флек показали, что эта модель неустойчива.

В 1923 г. А. Зоммерфельд предложил модель атома гелия, в которой электроны вращаются в противоположных направлениях по двум эллипсам, расположенным в одной плоскости. Хотя эта модель атома диамагнитна, она, по мнению самого Зоммерфельда, весьма искусственна и тоже не объясняет спектра гелия.

В. Гейзенберг в замечательной работе [94] *) под названием «О спектрах атомных систем с двумя электронами» полностью решил не только проблему гелия, но и указал общий метод рассмотрения в квантовой механике систем тождественных частиц (**).

Вот как сам Гейзенберг излагает программу исследований в своей работе: «Обсуждение этой проблемы с точки зрения новой квантовой механики еще не проводилось... Последующие расчеты должны представить отчет о движении электронов в названных атомах, поскольку об этих движениях можно говорить, как о квантово-механических. Они должны, так как это следует из законов квантовой механики, качественно и в грубом приближении количественно объяснить спектры He, Li⁺ и тому подобное. Цель этой

*) Я широко использую также книгу *Бете Г.* Квантовая механика простейших систем. — М.; Л.: ОНТИ, 1935, с. 75, в которой изложена работа Гейзенберга.

**) Симметрия волновых функций системы тождественных частиц рассматривалась Гейзенбергом уже немного раньше [95] и независимо — Дираком [96].

работы — получить результаты, которые следуют при систематическом применении обычной теории возмущений».

Главная особенность спектров гелиоподобных атомов — наличие двух оптически не комбинирующих систем термов или уровней энергии (орто- и паратермов).

Первая часть работы Гейзенберга носит название: «Расчет спектра без учета спина электронов».

Уравнение Шредингера для атома с зарядом ядра Ze и двумя электронами имеет вид

$$\Delta_1\psi + \Delta_2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = 0. \quad (1.1)$$

Здесь Δ_1 и Δ_2 — операторы Лапласа электронов 1 и 2 в декартовых координатах, $-Ze^2/r_1$ и $-Ze^2/r_2$ — потенциальные энергии этих электронов в поле неподвижного ядра, e^2/r_{12} — взаимная потенциальная энергия электронов, $\psi \equiv \psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) = \psi(1, 2)$ — волновая функция для стационарного состояния системы с энергией E , зависящая от координат обоих электронов.

В силу тождественности обоих электронов при перестановке их местами волновое уравнение (1.1) остается без изменения, поэтому $\psi(1, 2) = \kappa\psi(2, 1)$, где κ — постоянный множитель. Переставляя электроны местами два раза, получим $\psi(1, 2) = \kappa\psi(2, 1) = \kappa^2\psi(1, 2)$, откуда $\kappa^2 = 1$, т. е. $\kappa = \pm 1$; таким образом,

$$\psi(1, 2) = \pm\psi(2, 1). \quad (1.2)$$

Мы видим, что в силу тождественности обоих электронов при перестановке их местами волновая функция либо не меняет, либо меняет свой знак. В первом случае волновая функция симметрична и гелий в этом состоянии называется парагелием. Во втором случае, когда волновая функция антисимметрична, гелий называется ортогелием. Сейчас мы покажем, что в дипольном приближении невозможны оптические переходы между спектральными термами (энергетическими уровнями) пара- и ортосостояний. Пусть $\psi_s(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$ — симметричная функция паратерма, а $\psi_a(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$ — антисимметричная функция ортотерма. Амплитуда испущенной атомом при переходе $\psi_a \rightarrow \psi_s$ световой волны, поляризованной вдоль оси x , пропорциональна в дипольном приближении интегралу

$$\int \psi_s^*(1, 2) \psi_a(1, 2) (x_1 + x_2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (1.3)$$

где $d\tau_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ и, аналогично, $d\tau_2 = dx_2 dy_2 dz_2$. При перестановке переменных $x_1 \rightleftharpoons x_2 \dots$ функции ψ_s^* и $x_1 + x_2$ не изменяются, а функция ψ_a меняет знак. В результате интеграл будет равен самому себе с обратным знаком, т. е. равен нулю. Таким образом, Гейзенберг объяснил наличие у гелия двух оптически не комбинирующих систем спектроскопических термов (пара- и ортотермов).

Уравнение Шредингера (1.1) не допускает точного решения посредством разделения переменных из-за наличия слагаемого,

отвечающего за взаимодействия электронов, e^2/r_{12} . Для того чтобы применить теорию возмущений, надо в потенциальной энергии выделить «нулевой» член, для которого уравнение решается точно, и «малое» возмущение. В качестве «нулевого» члена в потенциальной энергии можно взять энергию взаимодействия электронов 1 и 2 с ядром: $-Ze^2/r_1$ и $-Ze^2/r_2$; тогда возмущение равно энергии взаимодействия электронов между собой e^2/r_{12} . При этом, однако, энергия возмущения не будет «мала» по сравнению с невозмущенной энергией (во всяком случае, для не слишком больших Z).

Гейзенберг строит поле, действующее на каждый электрон в отдельности, помещая в ядре заряд $+Ze$ и равномерно распределяя один отрицательный заряд $-e$ по поверхности сферы радиуса r_0 , среднего между радиусами состояний невозбужденного и возбужденного электрона. В этом случае невозмущенная потенциальная энергия имеет вид

$$U_0 = U(r_1) + U(r_2),$$

где

$$U(r) = \begin{cases} -(Z-1)e^2/r & \text{при } r > r_0, \\ -Ze^2/r + e^2/r_0 & \text{при } r < r_0. \end{cases} \quad (1.4)$$

Энергия возмущения тогда равна

$$w = -Ze^2/r_1 - Ze^2/r_2 + e^2/r_{12} - U_0 = e^2/r_{12} - u(r_1) - u(r_2), \quad (1.5)$$

где

$$u(r) = \begin{cases} e^2/r & \text{при } r > r_0, \\ e^2/r_0 & \text{при } r < r_0. \end{cases}$$

В нулевом приближении уравнение Шредингера (1.1) имеет вид

$$(\hbar^2/2m)(\Delta_1 + \Delta_2)\psi_0 + [E_0 - U(r_1) - U(r_2)]\psi_0 = 0, \quad (1.6)$$

где $U(r)$ определяется соотношением (1.4). Поскольку потенциальная энергия в (1.6) равна сумме, каждое слагаемое которой зависит от одного r_i ($i=1, 2$), уравнение (1.6) решается разделением переменных; при этом мы получим

$$E_0 = E_1 + E_2, \quad \psi_0(1, 2) = \psi_1(r_1, \vartheta_1, \varphi_1)\psi_2(r_2, \vartheta_2, \varphi_2), \quad (1.7)$$

где $r_i, \vartheta_i, \varphi_i$ ($i=1, 2$) — полярные координаты электронов 1 и 2. Каждая из собственных функций $\psi_i(r, \vartheta, \varphi)$ ($i=1, 2$) удовлетворяет одному и тому же уравнению:

$$[(\hbar^2/2m)\Delta + E_i - U(r)]\psi_i(r, \vartheta, \varphi) = 0, \quad (1.8)$$

при этом мы опустили значок i у аргументов собственной функции и у U .

Так как поле $U(r)$ сферически симметрично, то уравнение (1.8) решается разделением переменных в полярных координатах. Собственная функция уравнения (1.8) равна произведению шаровой функции $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ на радиальную функцию $R_{nl}(r)$, удовлетворяю-

щую, при малых радиусах состояния (малых квантовых числах n), уравнению Шредингера с полем

$$-Z e^2/r + e^2/r_0. \quad (1.9)$$

Соответствующее собственное значение равно

$$E_1' = -Z^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n^2 + e^2 / r_0. \quad (1.10)$$

В следующем приближении по полю мы будем рассматривать (1.9) как нулевое приближение, а разницу

$$U(r) - (1.9) = U(r) + Z e^2/r - e^2/r_0 = u(r) - e^2/r_0 \quad (1.11)$$

как возмущение; тогда энергия (1.10) в этом приближении по полю равна *)

$$E_1' = -Z^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n^2 + e^2 / r_0 + \overline{u(r) - e^2 / r_0}, \quad (1.12)$$

где

$$\overline{u(r) - e^2 / r_0} = \int_{r_0}^{\infty} (e^2/r - e^2/r_0) R_{n_1}^2(r) r^2 dr. \quad (1.12a)$$

Интегрирование нормированных шаровых функций по углам ϑ и φ дает единицу.

При больших значениях квантового числа n собственная функция электрона достигает наибольших значений при $r > r_0$, там, где его потенциальная энергия равна $(Z-1)e^2/r$. Собственное значение энергии электрона в нулевом приближении по полю равно

$$E_2' = (Z-1)^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n^2, \quad (1.13)$$

а в следующем приближении по полю, аналогично (1.12), равно

$$E_2' = -[(Z-1)^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n^2] + \overline{u(r) - e^2/r}, \quad (1.14)$$

где

$$\overline{u(r) - e^2/r} = \int_0^{r_0} (e^2/r_0 - e^2/r) R_{n_1}^2(r) r^2 dr. \quad (1.14a)$$

Если внутренний электрон имеет главное квантовое число n_1 , а внешний — $n_2 > n_1$, то, согласно (1.7), (1.12), (1.14), их полная энергия в нулевом приближении, согласно теории возмущений Шредингера, равна

$$E_0 = E_1' + E_2' = -Z^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n_1^2 - (Z-1)^2 e^4 m / 2 \hbar^2 n_2^2 + e^2 / r_0 + \int_0^{\infty} [u(r) - e^2/r_0] R_{n_1}^2(r) r^2 dr + \int_0^{\infty} [u(r) - e^2/r] R_{n_2}^2(r) r^2 dr. \quad (1.15)$$

*) Этот приближенный способ вычисления энергии отдельных электронов не имеет ничего общего с теорией возмущений Шредингера, которую мы применяем ниже.

Волновая функция для обоих электронов, согласно (1.7), равна

$$\psi_0'(1, 2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(r_2, \vartheta_2, \varphi_2), \quad (1.16)$$

но также равна и

$$\psi_0''(1, 2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}(r_2, \vartheta_2, \varphi_2) \psi_{n_2 l_2 m_2}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1), \quad (1.16a)$$

в которой тождественные электроны обменялись местами (или электроны обменялись квантовыми состояниями). Тождественность электронов приводит, таким образом, к вырождению энергии (1.15).

Собственные функции (1.16) или (1.16a) не являются правильными собственными функциями нулевого приближения, так как последние должны обладать той же симметрией, как и точные собственные функции (1.2). Мы можем, однако, из (1.16) и (1.16a) составить симметричную собственную функцию парасостояния:

$$\begin{aligned} \psi_+ &= (1/\sqrt{2}) (\psi_0' + \psi_0'') = \\ &= (1/\sqrt{2}) [\psi_{n_1 l_1 m_1}(1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(2) + \psi_{n_1 l_1 m_1}(2) \psi_{n_2 l_2 m_2}(1)] \end{aligned} \quad (1.17)$$

и антисимметричную собственную функцию ортосостояния:

$$\begin{aligned} \psi_- &= (1/\sqrt{2}) (\psi_0' - \psi_0'') = \\ &= (1/\sqrt{2}) [\psi_{n_1 l_1 m_1}(1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(2) - \psi_{n_1 l_1 m_1}(2) \psi_{n_2 l_2 m_2}(1)]. \end{aligned} \quad (1.17a)$$

Здесь множитель $1/\sqrt{2}$ необходим, если мы хотим, чтобы функции ψ_+ и ψ_- были нормированы на единицу, так же как функции ψ_{nlm} . Состояние атома гелия определено, если указаны квантовые числа n , l , m для обоих электронов и известно, относится ли состояние к пара- или ортогелию.

Спектр гелия отличается от водородного двумя особенностями:

1. Из-за того, что поле, действующее на каждый из электронов в атоме гелия, не чисто кулоновское (пропорциональное $1/r$), снимается вырождение по орбитальному квантовому числу l , поэтому каждый уровень с главным квантовым числом n расщепляется на n подуровней с $l=0, 1, 2, \dots, n-1$.

2. Существуют две оптически не комбинирующие системы термов пара- и ортогелия.

Легко показать, что энергия атома гелия, у которого оба электрона возбуждены до второго квантового уровня ($n_1=n_2=2$), а тем более выше, больше энергии иона гелия и свободного покоящегося электрона, т. е. лежит уже в непрерывном спектре и поэтому не реализуется. Таким образом, надо рассматривать только такие возбужденные состояния атома гелия, для которых квантовые числа электронов равны: 1, 0, 0; n , l , m .

Невозбужденное (основное) состояние атома гелия, когда $n_1=1$ и $n_2=1$, является состоянием парагелия. В самом деле, в этом случае $\psi_+ = \psi_{100}(1)\psi_{100}(2)$, а $\psi_- = 0$; нормировочный множитель $1/\sqrt{2}$ у ψ_+ может быть опущен, так как приведенное выраже-

ние уже нормировано на единицу. В возбужденном состоянии энергия атома гелия, согласно (1.15), если пренебречь интегралами, равна

$$E_0 = -2e^4 m / \hbar^2 + e^2 / r_0 - e^4 m / 2\hbar^2 n^2. \quad (1.18)$$

При оптических переходах меняется только последнее (третье) слагаемое, поэтому спектр гелия ближе к водородному, чем к иону гелия He^+ .

Все изложенные выше качественные особенности спектра гелия хорошо оправдываются на опыте.

Вычислим теперь энергию атома гелия в первом приближении теории возмущений. Шредингер в своей третьей статье указывает, что поправка к собственному значению энергии в первом приближении теории возмущений равна энергии возмущения, усредненной по собственным функциям нулевого приближения. В нашем случае энергия возмущения, связанная с взаимодействием электронов, равна (1.5), а собственные функции нулевого приближения равны (1.17) и (1.17а), поэтому поправка к собственному значению энергии равна

$$\begin{aligned} \epsilon = \frac{1}{2} \int \left[\frac{e^2}{r_{12}} - u(r_1) - u(r_2) \right] & [\psi_1(1) \psi_2(2) \pm \psi_1(2) \psi_2(1)] \times \\ & \times [\psi_1^*(1) \psi_2^*(2) \pm \psi_1^*(2) \psi_2^*(1)] d\tau_1 d\tau_2, \quad (1.19) \end{aligned}$$

где верхний знак, плюс, относится к парагелию, а нижний, минус, к ортогелию. Перемножая все три квадратные скобки подынтегрального выражения, получим 12 интегралов. Учитывая ортогональность и нормированность функций ψ_1 и ψ_2 и независимость интегралов от обозначения переменных, находим следующую поправку к собственному значению энергии:

$$\begin{aligned} \epsilon = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_1(1)|^2 |\psi_2(2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \pm \\ \pm \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_1(1) \psi_2^*(1) \psi_1^*(2) \psi_2(2) d\tau_1 d\tau_2 - \\ - \int u(r_1) |\psi_1(1)|^2 d\tau_1 - \int u(r_2) |\psi_2(2)|^2 d\tau_2. \quad (1.20) \end{aligned}$$

Энергия нулевого приближения атома гелия равна выражению (1.15), в котором следует положить $Z=2$, $n_1=1$ и $n_2=n$; интегралы мы дополнили шаровыми функциями, так что $R_{n_1 l_1}^2$ и $R_{n_2 l_2}^2$ можно заменить на $|\psi_1(1)|^2$ и $|\psi_2(2)|^2$; тогда

$$\begin{aligned} E_0 = -2e^4 m / \hbar^2 - e^4 m / 2\hbar^2 n^2 + e^2 / r_0 + \\ + \int \left[u(r_1) - \frac{e^2}{r_0} \right] |\psi_1(1)|^2 d\tau_1 + \int \left[u(r_2) - \frac{e^2}{r_2} \right] |\psi_2(2)|^2 d\tau_2. \quad (1.21) \end{aligned}$$

Заметим, что если для электрона 1 рассматривать состояние с $n_1=1$, то ψ_1 — вещественная функция, так что $\psi_1^* = \psi_1$ и $|\psi_1|^2 = \psi_1^2$; однако мы для наглядности сохраним более общее написание.

Таким образом, полная энергия атома гелия в первом приближении теории возмущений равна

$$E_0 + \varepsilon = -2e^4 m / \hbar^2 - e^4 m / 2\hbar^2 n^2 + C \pm A, \quad (1.22)$$

где
$$C = \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2} \right) |\psi_1(1)|^2 |\psi_2(2)|^2 d\tau_1 d\tau_2, \quad (1.23)$$

$$A = \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_1(1) \psi_2^*(1) \psi_1^*(2) \psi_2(2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (1.24)$$

Заметим, что полная энергия (1.22) не зависит от r_0 и $u(r_{ii})$; это существенно для оправдания нашей модели взаимодействия, выражаемой соотношением (1.4).

Физический смысл интеграла C поддается полуклассической интерпретации — он представляет собой энергию кулоновского взаимодействия электронов, распределенных с плотностями $|\psi_1(1)|^2$ и $|\psi_2(2)|^2$, и энергию взаимодействия электрона 2 с положительным зарядом $+e$ в центре атома.

Что касается интеграла A , то его происхождение чисто квантово-механическое; он представляет собой особый вид взаимодействия между электронами, каждый из которых переходит между состояниями $1 \rightleftharpoons 2$. Этот интеграл (или энергия) получил название обменного (по Гейзенбергу — Austauschenergie).

Как видно из (1.22), в нашем приближении параметры расположены выше ортотермов на величину $2A$, причем основное состояние, как было отмечено выше, является парагелием.

Интегралы C и A могут быть численно определены для различных состояний $\psi_2 \equiv \psi_{n_2 l_2 m_2}$ ($\psi_1 = \psi_{100}$), и результаты можно сравнить со спектроскопическими данными. Гейзенберг показывает, что совпадение имеет место по порядку величины.

Для того чтобы нагляднее представить себе обменную энергию A , допустим, что в момент времени $t=0$ электрон 2 захвачен ионом гелия He^+ . В таком случае волновая функция атома гелия в момент времени $t=0$ равна

$$\psi(0) = \psi_1(1) \psi_2(2) = (1/\sqrt{2})(\psi_+ + \psi_-), \quad (1.25)$$

как это следует из (1.17) и (1.17а); здесь $\psi_+ = \psi_{n_1 l_1 m_1}$ и $\psi_- = \psi_{n_2 l_2 m_2}$.

Волновая функция $\psi(t)$ в момент времени t получится, если к ψ_+ и ψ_- приписать временные множители пара- и ортосостояния; тогда

$$\begin{aligned} \psi(t) &= (1/\sqrt{2})(\psi_+ e^{-i[(E+A)/\hbar]t} + \psi_- e^{-i[(E-A)/\hbar]t}) = \\ &= e^{-iEt/\hbar} (1/2) \{ [\psi_1(1) \psi_2(2) + \psi_1(2) \psi_2(1)] [\cos(At/\hbar) - i \sin(At/\hbar)] + \\ &\quad + [\psi_1(1) \psi_2(2) - \psi_1(2) \psi_2(1)] [\cos(At/\hbar) + i \sin(At/\hbar)] \} = \\ &= e^{-iEt/\hbar} \{ \psi_1(1) \psi_2(2) \cos(At/\hbar) - i \psi_1(2) \psi_2(1) \sin(At/\hbar) \}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Здесь E — средняя энергия пара- и ортосостояния. Из (1.26) видно, что в момент времени $t=0$ реализуется начальное состояние электронов (1.25), когда электрон 1 находится в состоянии «1»

(1, 0, 0), а электрон 2 — в состоянии «2» (n, l, m). Из (1.26) видно также, что через время T_A , определяемое условием $AT_A/\hbar = \pi/2$, электроны обмениваются квантовыми состояниями; таким образом, время обмена равно

$$T_A = \pi\hbar/2A. \quad (1.27)$$

Вычисляя по формуле (1.24) обменный интеграл A для состояний «1» (1, 0, 0) и «2» (2, 1, 0), получим $T_A \approx 10^{-14}$ с; если же внешний электрон имеет квантовые числа $n=10, l=9$, то $T_A \approx 2,5 \cdot 10^8$ лет, хотя «диаметр» орбиты внешнего электрона равен лишь 100 радиусам Бора, т. е. $0,5 \cdot 10^{-6}$ см; это резкое возрастание времени обмена связано с тем, что при возбуждении внешнего электрона сильно уменьшается перекрытие волновых функций ψ_1 и ψ_2 .

Вторая часть работы Гейзенберга носит название «Спектр при учете спинов электронов».

Немного модернизируя обозначения и рассуждения Гейзенберга, рассмотрим влияние спина электронов на спектр гелия. Пусть s_{1z} и s_{2z} — спиновые квантовые числа электронов 1 и 2, принимающие значения $+1/2$ и $-1/2$; это означает, что проекция собственного момента импульса электрона на некоторое выделенное направление z принимает значения $+(1/2)\hbar$ и $-(1/2)\hbar$.

Обозначим собственную спиновую функцию, соответствующую параллельному направлению спина с осью z , через α , а антипараллельную направлению спина с осью z — через β :

$$\alpha(1) = \begin{cases} 1, & s_{1z} = +1/2, \\ 0, & s_{1z} = -1/2, \end{cases} \quad \beta(1) = \begin{cases} 0, & s_{1z} = +1/2, \\ 1, & s_{1z} = -1/2. \end{cases} \quad (1.28)$$

Такие же соотношения имеют место для собственных спиновых функций электрона 2: $\alpha(2)$ и $\beta(2)$.

Если пренебречь взаимодействием спинов с орбитой и спина со спином, то собственная функция обоих независимых электронов, казалось бы, может иметь следующий вид: $\alpha(1)\alpha(2)$, $\alpha(1)\beta(2)$, $\alpha(2)\beta(1)$ и $\beta(1)\beta(2)$.

При перестановке электронов $1 \rightleftharpoons 2$, первая и четвертая собственные функции не изменяются (симметричны), что же касается второй и третьей собственных функций, то они ни симметричны, ни антисимметричны. Из общих соображений ясно, что полная собственная функция, равная, в нашем приближении, произведению спиновой функции на координатную (1.17) или (1.17а), должна быть симметрична или антисимметрична, что возможно, только если мы соответствующим образом «симметризуем» спиновые функции.

Из четырех спиновых функций для системы двух электронов можно составить три симметричные функции:

$$\begin{aligned} S_+ &= \alpha(1)\alpha(2), \quad S_- = \beta(1)\beta(2), \\ S_0 &= (1/\sqrt{2}) [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], \end{aligned} \quad (1.29)$$

или одну антисимметричную функцию:

$$S_P = (1/\sqrt{2}) [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]. \quad (1.30)$$

В самом деле, переставляя электроны $1 \rightleftharpoons 2$, мы видим, что функции (1.29) не меняются, а функция (1.30) меняет свой знак.

Используя определение (1.28), нетрудно показать, что собственные спиновые функции (1.29) и (1.30) ортонормированы (для выполнения условий нормировки и введен у S_0 и S_P множитель $1/\sqrt{2}$).

Из спектроскопических наблюдений известно, что термы парагелия синглетны, а термы ортогогелия триплетны. Так как мультиплетность термов определяется взаимодействием спинов с внешним полем, с орбитой или друг с другом, то триплетности ортогогелия соответствуют произведения антисимметричной координатной функции (1.17а) и трех спиновых функций (1.29):

$$\psi_{-S_+}, \psi_{-S_-}, \psi_{-S_0}. \quad (1.31)$$

Наоборот, синглетности парагелия соответствует полная функция, равная произведению (1.17) и (1.30):

$$\psi_{+S_P}. \quad (1.32)$$

Мы видим, что полная волновая функция двух электронов всегда антисимметрична; один раз — за счет координатной части (1.31), другой раз — за счет спиновой части (1.32). Это находится в согласии с запретом Паули, согласно которому два электрона в атоме не могут находиться в одном квантовом состоянии. В самом деле, если $n_1 = n_2$, $l_1 = l_2$, $m_1 = m_2$ и $\alpha(1) = \alpha(2)$ ($\beta(1) = \beta(2)$), то собственные функции (1.31) и (1.32) равны нулю; в первом случае — за счет координатной части ($\psi_- = 0$), а во втором — за счет спиновой части ($S_P = 0$); но это и означает, что такие состояния системы из двух электронов не реализуются.

Мы не останавливаемся здесь на вычислениях Гейзенберга, посвященных относительно положению и интенсивности линий триплета ортогогелия, обусловленных спин-спиновым взаимодействием. Эти расчеты были с тех пор значительно усовершенствованы [97] и имеют не столь фундаментальное значение.

2. МОЛЕКУЛА ВОДОРОДА

В 1927 г. два молодых немецких физика Вальтер Гайтлер и Фриц Лондон, работая у Шредингера в Цюрихе, сделали важную работу, посвященную гомеоплярной связи. Эту работу под названием «Взаимодействие нейтральных атомов и гомеоплярная связь по квантовой механике» они опубликовали в журнале [98]. Она положила начало новому направлению в квантовой механике, называемому квантовой химией.

Вот как сами авторы характеризуют свою работу: «Взаимодействие между нейтральными атомами представляет для теоретиче-

ского рассмотрения существенные трудности. В то время как картина сил притяжения между ионами давно уже была ясна, ситуация для нейтральных атомов и особенно возможность неполярной связи чрезвычайно трудно объяснимы, во всяком случае, если не прибегать к весьма искусственным предположениям. Развитие квантовой механики открыло для рассмотрения этой проблемы новые точки зрения. . . »

Авторы ставят себе задачу исследовать изменение энергии двух атомов водорода при постепенном сближении их друг с другом; при этом расстояние между атомными ядрами (протонами) a и b считается фиксированным и равным R (это возможно, так как массы ядер много больше массы электронов, так что можно пренебречь кинетической энергией ядер по сравнению с кинетической энергией электронов).

Если электроны имеют номера 1 и 2, то r_{a1} , r_{b1} , r_{a2} , r_{b2} — расстояния от соответствующих ядер до соответствующих электронов, а r_{12} — расстояние между электронами.

Уравнение Шредингера для нашей задачи с шестью степенями свободы имеет вид

$$\hat{L}\psi = \Delta\psi + (2m/\hbar^2)(E - U)\psi = 0, \quad (2.1)$$

где

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 \quad (2.1a)$$

— оператор Лапласа электронов 1 и 2 в прямоугольных координатах, а

$$U = e^2/R - e^2/r_{a1} - e^2/r_{a2} - e^2/r_{b1} - e^2/r_{b2} + e^2/r_{12} \quad (2.1b)$$

— потенциальная энергия кулоновского взаимодействия ядер между собою (поскольку R — параметр задачи, она может быть включена в энергию E), потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами и потенциальная энергия взаимодействия электронов между собой. В силу тождественности электронов уравнение (2.1) инвариантно при их перестановке; как мы видели при изучении гелия, это означает, что волновая функция $\psi(1,2)$ либо симметрична, либо антисимметрична, т. е. либо не изменяется при перестановке электронов, либо меняет свой знак: $\psi(1,2) = \pm \psi(2,1)$.

Авторы в качестве нулевого приближения рассматривают два атома водорода, находящихся в основном состоянии ($n=1$, $l=0$) к на столь большом расстоянии друг от друга, что можно считать, что электрон 1 находится у ядра a , а электрон 2 — у ядра b . В этом случае ортонормированные волновые уравнения электронов равны (9.1.13):

$$\begin{aligned} \psi_a(1) &= (1/\sqrt{\pi})(1/a_B)^{3/2}e^{-r_{a1}/a_B}, \\ \psi_b(2) &= (1/\sqrt{\pi})(1/a_B)^{3/2}e^{-r_{b2}/a_B}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где a_B — боровский радиус, равный $\hbar^2/me^2 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см; энергия

этого состояния системы равна $2E_0$, где $|E_0| = me^4/2\hbar^2 = 13,55$ эВ — энергия основного состояния водорода.

Так как атомы независимы, то волновая функция системы равна

$$u(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2). \quad (2.2a)$$

С другой стороны, из-за тождественности электронов мы при их перестановке, вместо (2.2) и (2.2a), получим

$$\psi_a(2) = (1/\sqrt{\pi})(1/a_B)^{3/2}e^{-r_{a2}/a_B}, \quad (2.3)$$

$$\psi_b(1) = (1/\sqrt{\pi})(1/a_B)^{3/2}e^{-r_{b1}/a_B},$$

$$v(1, 2) = \psi_b(1)\psi_a(2) \quad (2.3a)$$

при той же энергии системы $2E_0$. Так как $u(1, 2)$ не равно $v(1, 2)$, то имеет место обменное вырождение.

Нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} \Delta u + (2m/\hbar^2)(2E_0 + e^2/r_{a1} + e^2/r_{b2})u &= 0, \\ \Delta v + (2m/\hbar^2)(2E_0 + e^2/r_{a2} + e^2/r_{b1})v &= 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Для того чтобы получить, например, первое из этих уравнений, надо уравнение Шредингера для функции $\psi_a(1)$ умножить на $\psi_b(2)$ и сложить его с уравнением Шредингера для $\psi_b(2)$, умноженным на $\psi_a(1)$. Аналогично получается и второе уравнение в (2.4). Сравнивая первое уравнение в (2.4) с точным уравнением (2.1), мы увидим, что в этом случае считается малой энергия взаимодействия

$$e^2/R - e^2/r_{a2} - e^2/r_{b1} + e^2/r_{12}, \quad (2.5)$$

что представляется естественным, когда электрон 1 связан с ядром a , а электрон 2 — с ядром b и расстояние между атомами велико. Аналогично, в случае противоположной ситуации, когда электрон 2 связан с ядром a , а электрон 1 — с ядром b , мала величина

$$e^2/R - e^2/r_{a1} - e^2/r_{b2} + e^2/r_{12}. \quad (2.5a)$$

Функции $u(1,2)$ и $v(1,2)$ еще не являются правильными собственными функциями нулевого приближения, так как последние должны обладать той же симметрией, что и точные волновые функции $\psi(1,2)$, т. е. быть либо симметричными, либо антисимметричными. Однако из u и v можно построить правильные функции нулевого приближения, считая симметричную функцию равной

$$\psi_+ = N_+(u+v) = N_+[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)] \quad (2.6)$$

и антисимметричную функцию равной

$$\psi_- = N_-(u-v) = N_-[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]. \quad (2.6a)$$

Здесь N_+ и N_- — нормировочные множители, определяемые из условия

$$\int \psi_{\pm}^2 d\tau_1 d\tau_2 = N_{\pm}^2 (2 + 2S) = 1, \quad (2.7)$$

где

$$S = \int uv d\tau_1 d\tau_2 = \int \psi_a(1) \psi_b(2) \psi_a(2) \psi_b(1) d\tau_1 d\tau_2. \quad (2.8)$$

Заметим, что так как все используемые нами собственные функции вещественны, то их комплексно-сопряженные значения равны самим функциям. Величина S , в отличие от случая гелия, отлична от нуля, так как функция $\psi_a(1)$ не ортогональна $\psi_b(1)$ (аналогично, $\psi_a(2)$ не ортогональна $\psi_b(2)$). В результате

$$\psi_+ = (2+2S)^{-1/2}(u+v), \quad \psi_- = (2-2S)^{-1/2}(u-v). \quad (2.9)$$

Переходя к теории возмущений, положим

$$\psi = \psi_{\pm} + \Phi_{\pm}, \quad E = 2E_0 + \varepsilon_{\pm}, \quad (2.10)$$

где Φ_{\pm} и ε_{\pm} — поправки первого порядка к собственной функции и собственному значению энергии. Из (2.1) и (2.10) следует, что

$$\hat{L}\Phi_{\pm} = -\hat{L}\psi_{\pm}. \quad (2.11)$$

Подставляя в правую часть выражения (2.9) для ψ_{\pm} и используя соотношения (2.4), получим

$$(\hbar^2/2m)(2 \pm 2S)^{1/2} \hat{L}\Phi_{\pm} = (-\varepsilon_{\pm} + e^2/R - e^2/r_{a2} - e^2/r_{b1} + e^2/r_{12})u \pm \pm(-\varepsilon_{\pm} + e^2/R - e^2/r_{a1} - e^2/r_{b2} + e^2/r_{12})v. \quad (2.11a)$$

В первую очередь нас интересует величина ε_{\pm} . Для того чтобы определить ее, помножим обе части уравнения (2.11a) на u и проинтегрируем по $d\tau_1 d\tau_2$; в результате найдем, что

$$\frac{\hbar^2}{2m}(2 \pm 2S)^{1/2} \int u \hat{L}\Phi_{\pm} d\tau_1 d\tau_2 = -\varepsilon_{\pm}(1 \pm S) + (C \pm A), \quad (2.12)$$

где мы обозначили

$$C = \int \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) u^2 d\tau_1 d\tau_2 = \\ = \int \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_a^2(1) \psi_b^2(2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (2.12a)$$

$$A = \int \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) uv d\tau_1 d\tau_2 = \\ = \int \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_a(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (2.12b)$$

Покажем, что интеграл в левой части равенства (2.12) — величина второго порядка малости. Для этого применим теорему Грина; тогда

$$\int u \hat{L}\Phi_{\pm} d\tau_1 d\tau_2 = \int \Phi_{\pm} \hat{L}u d\tau_1 d\tau_2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \int \Phi_{\pm} \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) d\tau_1 d\tau_2.$$

Здесь для $\hat{L}u$ мы использовали первое уравнение (2.4) и пренебрегли величиной $\Phi_{\pm}\epsilon_{\pm}$ второго порядка малости. Теперь видно, что весь интеграл — второго порядка малости, так как подынтегральное выражение равно произведению двух величин первого порядка малости Φ_{\pm} и (2.5); таким образом, в пределах нашего приближения его можно положить равным нулю; тогда из (2.12) следует, что

$$\epsilon_{\pm} = (C \pm A) / (1 \pm S). \quad (2.13)$$

Можно также обе части (2.11а) помножить не на u , а на v . Прделав затем те же самые операции, что и выше, мы получим то же самое значение для ϵ_{\pm} (2.13), в котором только определенные интегралы C и A будут отличаться обозначениями переменных интегрирования.

Интеграл C (см. (2.12а)), аналогично случаю гелия, определяет кулоновское взаимодействие электронов 1 и 2 между собой и с ядрами a и b и взаимодействие ядер между собой. Интеграл A (см. (2.12б)) равен обменному взаимодействию между электронами. Однако, как указывают авторы: «Все явление родственно квантово-механическому резонансу, рассмотренному Гейзенбергом (см. (1.24)); однако в то время как при резонансе электроны различных квантовых состояний ψ_1 и ψ_2 обмениваются энергией, в нашем случае они при одной и той же энергии обмениваются положениями между состояниями ψ_a и ψ_b ».

В наших расчетах по теории возмущения величина (2.5) или (2.5а) считается малой; это имеет место только для больших значений R/a_B . В дальнейшем мы будем прилагать наши расчеты и к случаю $R/a_B \ll 1$, поэтому наши выводы будут носить только качественный характер.

Очевидно, что величины S , C и A — функции R , поэтому возможно хотя бы графическое построение $\epsilon_{\pm}(R)$. На рис. 12 представлены зависимости $\epsilon_{\pm}(R/a_B)$, построенные авторами. Они пишут: «Приведенные кривые дают по порядку величины правильные значения: атомного поперечника, энергии диссоциации и момента инерции молекулы H_2 . Что касается оценки соответствующих ошибок, то можно показать, что во всяком случае ϵ_- должно лежать выше, а ϵ_+ — ниже

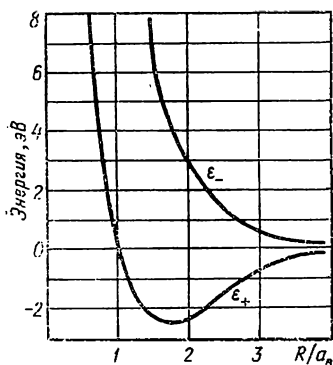


Рис. 12

изображенных на рисунке значений, что приводит к еще более выраженному характеру обоих взаимодействий. Так как мы не ставим себе целью получение более точных числовых значений, а стараемся только проникнуть в физическую сущность гомополярной связи, то ограничимся приведенными оценками».

Более поздние расчеты в приближении рассматриваемой работы дают для расстояния между ядрами водорода значение $R_0 = 0,79 \text{ \AA}$, что довольно хорошо совпадает с экспериментальным значением, равным $0,75 \text{ \AA}$; значение ϵ_{\min} в минимуме кривой ϵ_+ получается равным $\epsilon_{\min} = -3,2 \text{ эВ}$, в то время как экспериментальное значение существенно меньше и равно $-4,4 \text{ эВ}$. Если в энергии диссоциации молекулы H_2 учесть нулевые колебания ядер, то несоответствие становится еще большим.

В § 4 под названием «Принцип Паули и образование молекул», авторы пишут:

«Как легко понять, решения (2.6) и (2.6а) не комбинируют друг с другом (так как их линейная комбинация не будет удовлетворять определенной симметрии — А. А.). Это обстоятельство открывает возможность распространить принцип Паули, оказавшийся столь плодотворным при изучении электронных конфигураций отдельных атомов, на системы, состоящие из двух взаимодействующих атомов. . .

Для наших целей достаточна следующая формулировка. Выбранная собственная функция системы должна при обмене электронами менять (не менять) свой знак, когда оба электрона имеют параллельные (антипараллельные) спины (так называемые собственные функции спина рассматриваться при этом не будут).

Мы применим это правило для решений (2.6) и (2.6а). При перестановке электронов симметричное решение ψ_+ сохраняет свой знак, а антисимметричное решение ψ_- — меняет его на обратный. Таким образом, для ψ_+ у электронов спины антипараллельны, а для ψ_- — параллельны.

Так как для невзаимодействующих (т. е. разделенных) атомов нет каких-либо ограничений на спины электронов, то встречаются оба случая».

Может быть, все-таки было бы нагляднее исходить из полной собственной функции электронов, равной произведению координатной части ψ_+ или ψ_- на спиновую собственную функцию (см. гелий). В этом случае принцип Паули формулировался бы обычным образом — как невозможность существования электронов в двух одинаковых квантовых состояниях. Это тоже бы привело к представлению, что в случае связанного состояния ϵ_+ спины антипараллельны, а в случае отталкивания ϵ_- — параллельны.

Авторы рассматривают еще два вопроса: 1) взаимодействие атомов гелия и 2) образование иона водородной молекулы. На этих вопросах мы останавливаться не будем.

3. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ И ТЕОРИЯ α -РАСПАДА

Явление спонтанного ядерного распада, при котором метастабильное ядро распадается на две или более частицы без какого-либо внешнего воздействия, — одно из наиболее ярких проявлений законов квантовой механики.

Г. А. Гамов в работе «К квантовой теории атомного ядра» [99] дал квантово-механическую теорию радиоактивного α -распада. Независимо и почти одновременно соответствующие идеи были высказаны Р. Гёрни и Э. Кондоном [100].

Согласно существовавшей тогда точке зрения, атомное ядро состояло из протонов и электронов (нейтрон еще не был открыт), причем протоны и α -частицы удерживались в ядре какими-то некулоновскими силами.

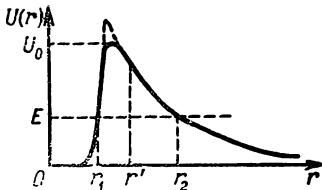


Рис. 13

Потенциальная энергия α -частицы $U(r)$ вблизи ядра должна иметь вид, изображенный на рис. 13. Здесь U_0 — максимум кривой взаимодействия α -частицы с ядром, E — энергия вылетающей α -частицы, r_1 и r_2 — расстояния на потенциальной кривой, соответствующие энергии E . Штриховая часть кривой взаимодействия вблизи ее вершины изображает кулоновское отталкивание α -частицы от ядра.

В чем же усматривалось основное противоречие в явлении α -распада?

Облучая ядро урана α -частицами, Резерфорд показал, что они приближаются к ядру на расстояние r' , примерно в два раза меньшее r_2 , причем остается справедливым закон кулоновского отталкивания: $2Ze^2/r$. С точки зрения классической механики было непонятно, как из ядра могут вылетать α -частицы с энергией E , соответствующей расстоянию r_2 . Для того чтобы объяснить это противоречие, Резерфорд сделал довольно искусственное предположение, что α -частица доходит до точки r_2 в нейтральном виде, а затем сбрасывает в точке r_2 нейтрализующие ее электроны обратно в ядро.

Гамов проницательно указал на то, что с точки зрения квантовой механики возможно проникновение α -частицы сквозь потенциальный барьер с энергией $E < U_0$; это явление получило название туннельного эффекта, оно является непосредственным следствием волновой природы частиц.

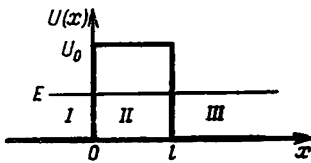


Рис. 14

Гамов рассматривает туннельный эффект на простейшем барьере, изображенном на рис. 14. Здесь частица падает слева (в области I) на прямоугольный барьер U_0 ($0 \leq x \leq l$). Потенциальная энергия $U(x) = 0$ вне барьера при $x < 0$ и $x > l$. Требуется вычислить вероятность перехода частицы из области

I в область III, когда ее энергия $E < U_0$. Гамов решает эту задачу не самым простым образом. Сейчас ее решение можно найти в любом учебнике квантовой механики (см., например, [101, § 25]).

Решение стационарного уравнения Шредингера для всех трех областей имеет вид:

для области I ($x < 0$)

$$\psi = e^{ikx} + Ae^{-ik_1x}, \text{ где } k_1 = (1/\hbar)(2mE)^{1/2}, \quad (3.1)$$

для области II ($0 < x < l$)

$$\psi = Be^{kx} + B'e^{-kx}, \text{ где } k = (1/\hbar)[2m(U_0 - E)]^{1/2}, \quad (3.1a)$$

для области III ($x > l$)

$$\psi = Ce^{ik_1x}, \text{ где } k_1 = (1/\hbar)(2mE)^{1/2}. \quad (3.1б)$$

Здесь, как всегда, $\hbar = h/2\pi$, где h — постоянная Планка. Так как нас интересует только отношение амплитуд волн, то мы считаем амплитуду падающей слева волны (в области I) равной единице; так как в области III имеется только прошедшая волна, мы считаем амплитуду второй волны (вдоль $-x$) равной нулю.

Мы имеем четыре коэффициента: A , B , B' и C , которые могут быть определены из условий непрерывности функции ψ и ее производной $d\psi/dx$ в точках $x=0$ и $x=l$; в результате мы получим для коэффициентов систему четырех линейных неоднородных уравнений. Коэффициент прозрачности определяется как вероятность прохождения сквозь барьер из области I в область III; он оказывается равным

$$D = k_1 |C|^2 / k_1 = |C|^2 = 4k_1^2 k^2 / [(k_1^2 + k^2)^2 \text{sh}^2(kl) + 4k_1^2 k^2]. \quad (3.2)$$

Нас будет интересовать случай $kl \gg 1$; тогда

$$\text{sh}(kl) = (1/2)(e^{kl} - e^{-kl}) \approx (1/2)e^{kl},$$

$$D = [16k_1^2 k^2 / (k_1^2 + k^2)^2] e^{-2kl} =$$

$$= [16E(U_0 - E) / U_0^2] e^{-(2/\hbar)[2m(U_0 - E)]^{1/2} l}. \quad (3.3)$$

Полагая в типичном случае $U_0 - E \approx 5$ МэВ и $l \approx 10^{-12}$ см, получим для α -частицы $kl \approx 10$.

Одномерный барьер $U(x)$ произвольной формы может быть разбит на элементарные барьеры прямоугольной формы, как показано на рис. 15. Нетрудно представить вероятность прохождения частиц сквозь такой барьер, как произведение вероятностей прохождения сквозь элементарные прямоугольные барьеры; так что коэффициент прозрачности барьера равен

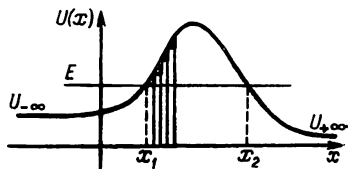


Рис. 15

$$D = \prod_x P'(x) \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int [2m(U(x) - E)]^{1/2} dx \right\} =$$

$$= P \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} [2m(U(x) - E)]^{1/2} dx \right\}. \quad (3.4)$$

Но если определение показателя степени через интеграл представляется довольно естественным, то определение предэкспоненциального множителя P достаточно сложно.

Гамов вообще не вычисляет D для прямоугольного барьера, заменяя это интуитивными рассуждениями. Как показано, например, в книге Гамова и Кричфельда [102, с. 162],

$$P = 4 [(E - U_{+\infty}) / (E - U_{-\infty})]^{1/2}, \quad (3.5)$$

где $U_{\pm\infty}$ — асимптотические значения потенциальной энергии при $x \rightarrow \pm \infty$.

Потенциальная энергия α -частицы вблизи реального атомного ядра обладает сферической симметрией. Зависимость $U(r)$ схематически изображена на рис. 13. Так как поле сферически симметрично, то радиальная часть волновой функции $\chi(r)$ удовлетворяет при $l=0$ *) уравнению (9.1.8):

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\chi}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \chi = 0. \quad (3.6)$$

Удобно положить

$$\chi = (1/r) u(r), \quad (3.7)$$

тогда из (3.6) следует

$$d^2u/dr^2 + (2m/\hbar^2) [E - U(r)] u = 0. \quad (3.8)$$

На больших расстояниях от ядра ($r \gg r_2$) $U(r) \rightarrow 0$ и решение (3.8) имеет вид

$$u(r) = C e^{ik_1 r} + C' e^{-ik_1 r}, \quad (3.9)$$

где C и C' — постоянные, а

$$k_1 = (2mE)^{1/2} / \hbar. \quad (3.9a)$$

Таким образом,

$$\chi = (C/r) e^{ik_1 r} + (C'/r) e^{-ik_1 r}. \quad (3.10)$$

Здесь первое слагаемое описывает сферическую волну, исходящую из ядра, второе — сферическую волну, сходящуюся к ядру. Так как нас интересует процесс испускания α -частиц, то мы в (3.10) будем учитывать только первое слагаемое.

Подсчитаем скорость убывания α -частиц внутри шара объема V , окружающего ядро:

$$\frac{d}{dt} \int_V \psi^* \psi dV = - \oint_S j_r dS = - \oint_{4\pi} j_r r^2 d\Omega. \quad (3.11)$$

Здесь S — поверхность сферы радиуса $r \gg r_2$, $d\Omega$ — элемент телес-

*) Заметим, что в радиоактивных ядрах ($Z \approx 80-90$, $r \approx 10^{-12}$ см) потенциальная энергия, соответствующая центробежным силам, очень мала по сравнению с кулоновской энергией, их отношение равно $(\hbar^2/2m) [l(l+1)/r^2] (2Ze^2/r)^{-1} \approx 0,002l(l+1)$.

ного угла, а

$$j_r = (i\hbar/2m) (\psi \partial \psi^* / \partial r - \psi^* \partial \psi / \partial r) \quad (3.11a)$$

— составляющая плотности тока, нормальная к поверхности шара радиуса r . Подставляя в (3.11a)

$$\psi(r) = (4\pi)^{-1/2} \chi(r) = (4\pi)^{-1/2} (C/r) e^{ik_1 r} \quad (3.12)$$

(здесь сферическая функция $\Gamma_{00} = (4\pi)^{-1/2}$), получим из (3.11)

$$\frac{d}{dt} \int_V \psi^* \psi dV = -\frac{\hbar k_1 |C|^2}{m} < 0. \quad (3.13)$$

Этот результат представляется естественным. Поскольку из ядра выходит постоянный поток частиц, число их в объеме V непрерывно уменьшается. Если мы, однако, подставим (3.12) в левую часть (3.11), то получим нуль. Связано это с тем, что мы считаем при этом состояние стационарным, для которого полная волновая функция, равная

$$\Psi(r, t) = \psi(r) e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.14)$$

гармонически зависит от времени. Для того чтобы учесть квазистационарность процесса α -распада, Гамов предложил ввести параметр

$$E = E_0 - (i\hbar\lambda/2), \quad (3.15)$$

т. е. в некотором смысле предложил считать энергию комплексной величиной. Подставляя (3.15) в (3.14), получим

$$\Psi(r, t) = \psi(r) e^{-\lambda t/2} e^{-iE_0 t/\hbar}, \quad (3.16)$$

-- амплитуда волновой функции убывает по экспоненциальному закону. Для того чтобы состояние можно было рассматривать как квазистационарное, надо, чтобы E_0/\hbar было много меньше, чем λ ; например, для RaC: $E_0/\hbar \approx 10^{-5}/10^{-27} \approx 10^{22} \text{ с}^{-1}$, а $\lambda = 10^5 \text{ с}^{-1}$. Величина λ называется постоянной распада.

Среднее число частиц в объеме V_0 в момент времени t равно

$$N(t) = \int_{V_0} \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) dV = e^{-\lambda t} \int_{V_0} \psi^*(r) \psi(r) dV = e^{-\lambda t} N(0).$$

Таким образом,

$$N(t) = N(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.17)$$

Мы видим, что за время $\tau = 1/\lambda$ число частиц в фиксированном объеме V_0 уменьшается в $e = 2,72$ раза.

Если подставить (3.16) в (3.11), то мы получим

$$\frac{d}{dt} e^{-\lambda t} \int_V \psi^*(r) \psi(r) dV = -\frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 e^{-\lambda t}. \quad (3.18)$$

Выполняя дифференцирование в левой части, получим для посто-

янной распада значение, равное

$$\lambda = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 \left[\int_V \psi^*(r) \psi(r) dV \right]^{-1}. \quad (3.19)$$

Полагая $\hbar k_1/m = v_{\text{внеш}}$, т. е. скорости α -частицы вне ядра, и учитывая, что

$$\int_V \psi^*(r) \psi(r) dV = \int_0^{r_1} u^* u dr = \frac{1}{2} A^2 r_1, \quad (3.20)$$

где A — амплитуда осцилляторного движения α -частицы внутри ядра ($U(r) = \text{const}$) с линейными размерами r_1 , получим

$$\lambda = (2v_{\text{внеш}}/r_1) |C/A|^2 = (2v_{\text{внеш}}/r_1) D, \quad (3.21)$$

где $D = |C/A|^2$ — коэффициент прозрачности барьера ядра для α -частицы.

Мы воспользуемся для D выражением (3.4), т. е.

$$D = 4 \frac{v_{\text{внут}}}{v_{\text{внеш}}} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} [2m(U(r) - E)]^{1/2} dr \right\}, \quad (3.22)$$

где $v_{\text{внут}} \sim (E - U_{-\infty})^{1/2}$ — скорость α -частицы внутри ядра и, аналогично, $v_{\text{внеш}} \sim (E - U_{+\infty})^{1/2}$ — ее скорость вне ядра. В результате из (3.21) для постоянной распада получим

$$\lambda = \frac{8v_{\text{внут}}}{r_1} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} [2m(U(r) - E)]^{1/2} dr \right\}. \quad (3.23)$$

Преэксспоненциальный множитель здесь имеет наглядный смысл, так как отношение $v_{\text{внут}}/2r_1$ пропорционально числу ударов α -частицы о внутриядерный барьер в одну секунду.

Для сравнения теории α -распада с опытом, преобразуем выражение для постоянной распада (3.23):

$$\lg \lambda = \lg \left(\frac{8v_{\text{внут}}}{r_1} \right) - \frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} [2m(U(r) - E)]^{1/2} dr. \quad (3.24)$$

В качестве потенциальной энергии $U(r)$ возьмем кулоновское взаимодействие α -частицы с ядром, равное $2Ze^2/r^*$; это предположение хорошо оправдывается, так как $U(r)$ круто обрывается при проникновении α -частицы в ядро. Вычислим в этом предположении интеграл в (3.24):

$$J = \int_{r_1}^{r_2} \left[2m \left(\frac{2Ze^2}{r} - E \right) \right]^{1/2} dr = (2m)^{1/2} \int_{r_1}^{2Ze^2/E} \left(\frac{2Ze^2}{r} - E \right)^{1/2} dr, \quad (3.25)$$

где $r_2 = 2Ze^2/E$. Введем новую переменную интегрирования $\xi =$

* Здесь Z — номер атомного ядра после испускания α -частицы.

$= r/r_2 = rE/2Ze^2$; тогда

$$J = 2Ze^2 \left(\frac{2m}{E}\right)^{1/2} \int_{r_1/r_2}^1 \left(\frac{1}{\xi} - 1\right)^{1/2} d\xi. \quad (3.26)$$

Для вычисления последнего интеграла положим $\xi = \cos^2 u$; выражение (3.26) примет вид

$$J = Ze^2 (2m/E)^{1/2} (2u_0 - \sin 2u_0), \quad (3.27)$$

где $\cos^2 u_0 = r_1/r_2$ будем считать малой величиной ($r_1 \ll r_2$); тогда $u_0 = \pi/2 - \varepsilon$, где $\varepsilon \ll 1$. Разлагая круглую скобку в (3.27) в ряд по ε и ограничиваясь двумя членами, получим

$$J = (2\pi Ze^2/v_{\text{внеш}}) - 4e(mZr_1)^{1/2}. \quad (3.28)$$

Здесь $v_{\text{внеш}} = (2E/m)^{1/2}$ — скорость α -частицы вне ядра. В результате находим

$$\lg \lambda = \lg(8v_{\text{внут}}/r_1) - 4\pi Ze^2/\hbar v_{\text{внеш}} + 8e(mZr_1)^{1/2}/\hbar. \quad (3.29)$$

Наиболее замечательным следствием теории является зависимость между $\lg \lambda$ и скоростью α -частицы $v_{\text{внеш}}$. Такая зависимость еще задолго до квантовой теории этого явления была установлена на опыте Г. Гейгером и Дж. Нэттолом (1909 г.).

Из опыта известно, что для различных радиоактивных элементов постоянная распада λ меняется в очень широких пределах: от 10^{14} до 10^{-18} с $^{-1}$. Сравнение опытных данных с формулой (3.29) показывает, что широкое изменение λ связано с различием в скоростях α -частиц; в то же время радиус ядер r_1 меняется в узких пределах: от $5 \cdot 10^{-12}$ до $9 \cdot 10^{-12}$ см, что хорошо согласуется с данными о рассеянии α -частиц. Все это свидетельствует о хорошем согласии теории α -распада с опытом.

4. О КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

В 1928 г. ассистент Гейзенберга Феликс Блох опубликовал под этим названием обширную статью [66].

Блох указал, что применение статистики Ферми к электронам проводимости, рассматриваемым как идеальный газ, ознаменовалось рядом крупных достижений. Паули объяснил таким образом малую величину и слабую температурную зависимость парамагнетизма электронов проводимости. Зоммерфельд показал, что электроны проводимости должны вносить малый вклад в теплоемкость металла; ему же удалось удовлетворительно рассмотреть электро- и теплопроводность электронов проводимости и их гальваномагнитные и термоэлектрические свойства. Однако для описания кинетических явлений Зоммерфельд был вынужден феноменологически ввести длину свободного пробега электронов, которую он мог определить только из сравнения с опытными данными. При этом оказалось, что длина свободного пробега на два порядка

больше постоянной решетки, в то время как с точки зрения классической механики она должна была бы быть порядка постоянной решетки.

Как же учесть, хотя бы в грубом приближении, взаимодействие электрона с ионами решетки и другими электронами проводимости? Блох рассматривает этот вопрос в § 1 своей работы.

Он считает, что усредненное эффективное поле, действующее на рассматриваемый электрон, обладает трехмерной периодичностью кристаллической решетки. А именно если \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 — основные векторы решетки, а

$$\mathbf{a}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 — \text{целые числа}) \quad (4.1)$$

— трансляционный вектор решетки, то поле $V(\mathbf{r})$, действующее на электрон, обладает свойством

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = V(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

т. е. трехмерно периодически.

Далее Блох исследует движение электрона в поле $V(\mathbf{r})$. Уравнение Шредингера для электрона с энергией E имеет вид

$$\nabla^2 \psi + (2m/\hbar^2) [E - V(\mathbf{r})] \psi = 0, \quad (4.3)$$

где $V(\mathbf{r})$ обладает свойством (4.2). В дальнейшем, для простоты, будем считать, что основные векторы \mathbf{a}_i ($i=1, 2, 3$) взаимно перпендикулярны и направлены по осям x, y, z .

Для того чтобы упростить решение задачи и не рассматривать граничных условий для ψ -функции на поверхностях конечного кристалла, мы введем так называемые циклические условия Борна — Кармана, которые были введены при рассмотрении колебаний атомов кристаллической решетки. Согласно этим условиям, бесконечный кристалл разбивается на параллелепипеды с ребрами $G_1 \mathbf{a}_1$, $G_2 \mathbf{a}_2$ и $G_3 \mathbf{a}_3$ (G_1, G_2, G_3 — большие целые числа) и считается, что колебания (ψ -функция) трехмерно периодичны в этих параллелепипедах (такой параллелепипед называется основной областью). Если, как мы предполагали, \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 взаимно перпендикулярны, то

$$\begin{aligned} \psi(x + G_1 a_1, y, z) &= \psi(x, y + G_2 a_2, z) = \psi(x, y, z + G_3 a_3) = \\ &= \psi(x, y, z). \end{aligned}$$

Если оператор, действующий на $\psi(\mathbf{r})$ в уравнении (4.3), инвариантен относительно смещения \mathbf{a}_n и если $\psi(\mathbf{r})$ — решение уравнения, то $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ — тоже его решение.

Рассмотрим два случая.

1. Функция $\psi(\mathbf{r})$ — невырожденное решение уравнения (4.3), соответствующее энергии E ; тогда $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ отличается от $\psi(\mathbf{r})$ только постоянным множителем:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = c \psi(\mathbf{r}). \quad (4.4)$$

Если $\psi(\mathbf{r})$ ортонормированы, то

$$|c|^2 = 1. \quad (4.5)$$

2. Решение уравнения (4.3) вырождено, т. е. энергии E соответствуют f собственных функций: $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$; так как эта система функций полная, то

$$\psi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = \sum_{\nu=1}^f c_{\mu\nu} \psi_\nu(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

Если выбрать в основной области собственные функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ ортонормированными, а это, как известно, всегда возможно, то

$$\begin{aligned} \int \psi_\mu^*(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) \psi_\nu(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) d\tau &= \delta_{\mu\nu} = \\ &= \int \sum_{\lambda} c_{\mu\lambda}^* \psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \sum_{\tau} c_{\nu\tau} \psi_\tau(\mathbf{r}) d\tau = \sum_{\lambda} \sum_{\tau} c_{\mu\lambda}^* c_{\nu\tau} \int \psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \psi_\tau(\mathbf{r}) d\tau = \\ &= \sum_{\lambda} \sum_{\tau} c_{\mu\lambda}^* c_{\nu\tau} \delta_{\lambda\tau} = \sum_{\lambda} c_{\mu\lambda}^* c_{\nu\lambda}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Здесь интегрирование ведется по основной области; отсюда следует, что матрица $\|c_{\mu\lambda}\|$ унитарна.

Поскольку группа трансляций коммутативна, мы можем теперь посредством линейного преобразования найти новые собственные (базисные) функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$, для которых матрица $\|c_{\mu\nu}\|$ диагональна; тогда, вместо (4.6), получим

$$\psi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = \sum_{\nu} c_{\nu} \delta_{\mu\nu} \psi_\nu(\mathbf{r}) = c_{\mu} \psi_\mu(\mathbf{r}). \quad (4.8)$$

Мы видим, что теперь каждая из вырожденных функций ψ_μ удовлетворяет условию (4.4); следовательно, аналогично (4.5),

$$|c_\mu|^2 = 1. \quad (4.9)$$

Нетрудно определить, как c_μ зависит от \mathbf{a}_n . Если произвести два последовательных смещения \mathbf{a}_n и \mathbf{a}_l , то результирующее смещение равно их сумме $\mathbf{a}_n + \mathbf{a}_l$, а результирующий коэффициент равен произведению соответствующих коэффициентов. Это означает, что коэффициент c_μ экспоненциально зависит от \mathbf{a}_n , а именно

$$c_\mu = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}, \quad (4.10)$$

где \mathbf{k} — параметр, характеризующий квантовое состояние электрона. Мнимая единица $i = \sqrt{-1}$, введенная в показатель степени (4.10), обеспечивает выполнение условия (4.9) и делает волновую функцию конечной при неограниченном росте смещения \mathbf{a}_n .

Согласно (4.4), (4.8) и (4.10), волновая функция электрона в кристалле обладает следующим свойством:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \psi(\mathbf{r}). \quad (4.11)$$

Решая (4.11) относительно $\psi(\mathbf{r})$, получим

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4.11a)$$

где мы ввели функцию

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n), \quad (4.11б)$$

которая обладает периодичностью решетки; в самом деле,

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) &= e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l + \mathbf{a}_n)} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l + \mathbf{a}_n) = \\ &= e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Отсюда, в частности, следует, что $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ не зависит от номера узла решетки.

Имеется, конечно, бесконечное множество состояний s с разной энергией, относящихся к одному и тому же значению \mathbf{k} ; таким образом, в общем случае электрон в периодическом поле описывается собственной волновой функцией

$$\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}), \quad (4.12)$$

где $u_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ — трехмерно периодичная в кристалле функция.

Собственная функция электрона (4.12) называется функцией Блоха, она представляет собой плоскую волну $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ с амплитудой, периодичной с решеткой. Вектор \mathbf{k} , называемый волновым вектором, обнаруживает многие свойства, аналогичные волновому вектору свободного электрона ($k = 2\pi/\lambda = p/\hbar$, где p — импульс свободного электрона). Однако \mathbf{k} обладает рядом специфических свойств, обусловленных дискретной структурой решетки. В самом деле, из (4.11a) следует, что волновая функция электрона при нашем выборе основных векторов \mathbf{a}_i пропорциональна множителю

$$e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} = e^{-i(k_x n_1 a_1 + k_y n_2 a_2 + k_z n_3 a_3)}.$$

Если прибавить теперь к k_x слагаемое $2\pi/a_1$, умноженное на целое число, то волновая функция (4.11a) не изменится (приобретет множитель, равный единице). Отсюда следует, что k_x достаточно рассматривать в интервале $2\pi/a_1$ (аналогично k_y и k_z), т. е.

$$-\pi/a_1 \leq k_x \leq \pi/a_1, \quad -\pi/a_2 \leq k_y \leq \pi/a_2, \quad -\pi/a_3 \leq k_z \leq \pi/a_3. \quad (4.13)$$

Циклические условия Борна — Кармана приводят к своеобразной квазидискретности волнового вектора \mathbf{k} и ограничивают полное число его возможных значений. Согласно этим условиям, точки x и $x + G_1 a_1$ эквивалентны (аналогично, y и z), т. е. им соответствуют одни и те же значения волновой функции (4.12). Так как $u_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ — периодическая в решетке функция, то достаточно потребовать, чтобы дополнительное слагаемое в показателе степени в (4.12), связанное с циклическостью, равнялось $i k_x G_1 a_1 = i 2\pi g_1$, где

g_1 — целое число; отсюда следует, что

$$k_x = (2\pi/a_1) g_1/G_1 \text{ и, аналогично, } k_y = (2\pi/a_2) g_2/G_2, \\ k_z = (2\pi/a_3) g_3/G_3. \quad (4.14)$$

Используя ограничение (4.13), мы видим, что целые числа g_i удовлетворяют неравенствам

$$-G/2 \leq g_i \leq G/2 \quad (i=1, 2, 3). \quad (4.15)$$

Из (4.15) вытекает, что полное число квазидискретных значений k равно $G_1 G_2 G_3$. Мы видим, что циклические условия Борна — Кармана сделали число состояний электрона в кристалле конечным, что весьма удобно при определении равновесных статистических величин.

Волновая функция электрона в периодическом поле может быть записана в виде

$$\psi_{g_1 g_2 g_3} = \exp [2\pi i (g_1 x/L_1 + g_2 y/L_2 + g_3 z/L_3)] u_{g_1 g_2 g_3}(x, y, z), \quad (4.16)$$

где k_x, k_y, k_z заменены соотношениями (4.14), а $L_1 = G_1 a_1, L_2 = G_2 a_2$ и $L_3 = G_3 a_3$ — длины ребер параллелепипеда основной области. Числа g_1, g_2, g_3 можно рассматривать как квантовые, определяющие состояния электрона в решетке.

Блох пишет:

«По поводу специального вида функции $u_{g_1 g_2 g_3}$, ничего не говорится. Она зависит, конечно, от вида потенциала $V(\mathbf{r})$, кроме того, она, наряду с g_1, g_2, g_3 , может зависеть и от других квантовых чисел.

То обстоятельство, что собственная функция электрона (4.16) всегда допускает отщепление множителя $\exp[2\pi i (g_1 x/L_1 + g_2 y/L_2 + g_3 z/L_3)]$, причем остаток обнаруживает еще периодичность решетки, может быть наглядно сформулировано, как то, что мы имеем дело с плоской дебройлевской волной, модулированной с периодом кристаллической решетки. Это сходство с собственной функцией свободного движения и обуславливает для электронов проводимости высокую подвижность, наблюдаемую в электропроводности металлов».

В § 2 своей работы Блох рассматривает сильно связанные электроны. Под этим он понимает случай, когда взаимодействие атомов решетки мало по сравнению с энергией рассматриваемого электрона проводимости.

Блох пишет: «Более точную картину нашего случая можно получить, если рассматривать дифференциальное уравнение (4.3) с точки зрения возмущений, подобно тому, как это сделали Гайтлер и Лондон при изучении взаимодействия двух атомов водорода. Но в то время как там мы имели дело с задачей двух тел, здесь из-за пренебрежения взаимодействиями между электронами мы имеем задачу одного тела».

Очевидно, что такое приближение хорошо оправдывается, когда энергия электрона на данном узле много меньше его взаимо-

действия с другими узлами решетки. Для электронов проводимости металла это не имеет места, поэтому выводы работы имеют только качественное значение.

В дальнейшем я, не меняя по сути вывода автора, придерживаюсь своей книги [103, с. 231]. Пусть волновая функция электрона $\psi_0(\mathbf{r})$ в изолированном атоме в s -состоянии удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-\left(\hbar^2/2m\right)\nabla^2\psi_0+U(\mathbf{r})\psi_0=E_0\psi_0, \quad (4.17)$$

где $U(\mathbf{r})$ — сферически симметричное поле изолированного иона металла, E_0 — энергия рассматриваемого состояния электрона в атоме. Волновая функция $\psi_0(\mathbf{r})$ нормирована на единицу. Вблизи n -го узла решетки электрон в изолированном атоме описывается волновой функцией $\psi_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}_n|)$. Так как все узлы основной области эквивалентны, то состояние электрона с энергией E_0 $G_1G_2G_3$ -кратно вырождено. Под влиянием взаимодействия электрона со всеми узлами уровень энергии E_0 смещается и расщепляется в полосу.

Таким образом, к задаче надо применить теорию возмущений Шредингера для вырожденных состояний (см. гл. IX, раздел 5). Однако уже из общих соображений ясно, что невозмущенная волновая функция должна представлять собой линейную комбинацию функций ψ_0 :

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_n c_n\psi_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}_n|). \quad (4.18)$$

Коэффициенты разложения c_n надо выбрать так, чтобы функция $\psi(\mathbf{r})$ удовлетворяла условию трансляционной симметрии, т. е. виду (4.12). Нетрудно видеть, что для этого надо положить $c_n=\exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n)$, т. е.

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}\psi_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}_n|)=e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\sum_n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n-\mathbf{r})}\psi_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}_n|). \quad (4.19)$$

В самом деле, заменяя в сумме последнего выражения \mathbf{r} на $\mathbf{r}+\mathbf{a}_n$, мы видим, что функция действительно обладает периодичностью решетки.

Если $V(\mathbf{r})$ — самосогласованный периодический потенциал, действующий на электрон (с учетом среднего поля других электронов), так что, конечно, $V(\mathbf{r})\neq\sum_n U(\mathbf{r}-\mathbf{a}_n)$, то одноэлектронная волновая функция в кристалле удовлетворяет уравнению

$$\mathcal{H}\psi=-\left(\hbar^2/2m\right)\nabla^2\psi+V(\mathbf{r})\psi=E\psi, \quad (4.20)$$

где E — собственное значение энергии электрона, движущегося в кристалле. Умножая обе части равенств (4.20) слева на ψ^* и интегрируя по основной области, получим

$$E=\frac{\int\psi^*\mathcal{H}\psi\,d\tau}{\int\psi^*\psi\,d\tau}=\frac{\int\psi^*[-\left(\hbar^2/2m\right)\nabla^2+V(\mathbf{r})]\psi\,d\tau}{\int\psi^*\psi\,d\tau}. \quad (4.21)$$

Вычислим энергию электрона в предположении, что его волновая функция задается выражением (4.19). Обозначая $\mathbf{r} - \mathbf{a}_n = \rho_n$, получим

$$E = E_0 + \frac{\sum_m \sum_n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_m)} \int \psi_0^*(\rho_m) [V(\mathbf{r}) - U(\rho_n)] \psi_0(\rho_n) d\tau}{\sum_m \sum_n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_m)} \int \psi_0^*(\rho_m) \psi_0(\rho_n) d\tau},$$

где было использовано уравнение (4.17) для замены $(-\hbar/2m)\nabla^2 \psi_0(\rho_n)$. Ввиду эквивалентности всех узлов решетки можно положить $m=0$ (т. е. $\mathbf{a}_m=0$, $\rho_m=\mathbf{r}$), а суммирование по m заменить в числителе и знаменателе умножением на одно и то же число, равное числу узлов в основной области. Таким образом,

$$E = E_0 + \frac{\sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - U(\rho_n)] \psi_0(\rho_n) d\tau}{\sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \int \psi_0^*(\mathbf{r}) \psi_0(\rho_n) d\tau}. \quad (4.22)$$

Если пренебречь перекрытием волновых функций для соседних узлов, то интеграл в знаменателе будет равен δ_{0n} и весь знаменатель равен единице. Интегралы в числителе (если $n=0$, \mathbf{n}' — вектор соседних узлов) обозначим:

$$\int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r})] \psi_0(\mathbf{r}) d\tau = -C, \quad (4.23)$$

$$\int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - U(\rho_{\mathbf{n}'})] \psi_0(\rho_{\mathbf{n}'}) d\tau = -A_{\mathbf{n}'}. \quad (4.23a)$$

Существуют качественные соображения, почему оба интеграла отрицательны. Из трех последних равенств вытекает, что

$$E = E_0 - C - \sum_{\mathbf{n}'} A_{\mathbf{n}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{n}'}}. \quad (4.24)$$

Если волновая функция $\psi_0(\mathbf{r})$ относится к s -состоянию, то $A_{\mathbf{n}'}$ зависит только от расстояния между нулевым узлом и атомом \mathbf{n}' первой координационной группы, т. е. одинаково для всех этих атомов. В этом случае

$$E = E_0 - C - A \sum_{\mathbf{n}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{n}'}}. \quad (4.25)$$

В простой кубической решетке имеем

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}'}^{1,6} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{n}'}} &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}a} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}a} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{y}a} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{y}a} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{z}a} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{z}a} = \\ &= 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \end{aligned}$$

где a — постоянная решетки. Подставляя последнее равенство в (4.25), получим

$$E = E_0 - C - 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (4.26)$$

Мы видим, что атомный терм E_0 смещается на величину C и рас-

щепляется, образуя полосу (зону) энергии шириной $12 A$; последнее следует из того, что каждый из косинусов в (4.26) изменяется от $+1$ до -1 в соответствии с (4.13).

Блох вычисляет также x -составляющую тока электрона, находящегося в k -состоянии; Блох выражает эту составляющую через плотность тока, проинтегрированную по поверхности параллелепипеда основной области. Формула, которую он получает, не очень конструктивна, поэтому мы воспользуемся другим выражением для средней квантово-механической скорости (тока) электрона в k -состоянии. Как, например, показано в [103, с. 214], средняя скорость

$$\bar{v} = (1/m) \bar{p} = (\hbar/im) \int \psi_k^* \nabla \psi_k d\tau = (1/\hbar) \nabla_k E(k). \quad (4.27)$$

Здесь $(\hbar/i)\nabla$ — оператор импульса p электрона и ∇_k — градиент в пространстве волнового вектора k .

Для свободного электрона энергия $E(k) = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$, поэтому

$$\bar{v} = (1/\hbar) \nabla_k (\hbar^2 k^2/2m) = \hbar k/m = p/m, \quad (4.28)$$

в согласии с ожидаемым.

Для сильно связанного электрона x -составляющая для средней скорости, согласно (4.27), равна

$$\bar{v}_x = (1/\hbar) \partial E / \partial k_x = (2Aa/\hbar) \sin ak_x. \quad (4.29)$$

Отсюда и из (4.13) видно, что в центре зоны энергии и на ее границах скорость электрона равна нулю; кроме того, в центре она меняет знак. Важно отметить (это вытекает из (4.29)), что при любой степени связи электрону соответствует конечный незатухающий ток, т. е. сопротивление металла равно нулю.

Далее Блох рассматривает ряд важных вопросов, на которых мы, однако, останавливаться не будем, а только кратко их перечислим.

В § 3 Блох рассматривает теплоемкость вырожденного и невырожденного электронного газа, находящегося в периодическом поле кристалла. Результаты, которые он при этом получает, практически ничего не добавляют к соответствующему исследованию Зоммерфельда.

В § 4 Блох рассматривает ускорение электрона проводимости в однородном электрическом поле напряженности E , направленном вдоль оси x . Для исследования этого вопроса он представляет волновую функцию электрона в виде волнового пакета:

$$\Psi = \sum_k c_k(t) \psi_k e^{-iE_k t/\hbar}. \quad (4.30)$$

Блох получает формулу

$$(d/dt) |c_k|^2 = -(eF/\hbar) (\partial/\partial k_x) |c_k(0)|^2. \quad (4.31)$$

В обширном § 5 Блох рассматривает взаимодействие электро- на проводимости с упругими колебаниями решетки; он широко использует теорию колебаний решетки Борна — Кармана. Пользуясь теорией возмущений, он вычисляет вероятность перехода для электрона при поглощении и испускании фонона. Затем Блох, используя кинетическое уравнение, вычисляет удельную электриче- скую проводимость. Он получает, что при высоких температурах ($T > \theta_D$ — температуры Дебая) удельная электрическая проводи- мость $\sigma \sim T^{-1}$, а при низких температурах ($T \ll \theta_D$) — $\sigma \sim T^{-3}$. По- следний результат оказался неверным, и в более поздней работе [104] Блох показал, что, на самом деле, при низких температурах $\sigma \sim T^{-5}$.

НОВЫЕ АСПЕКТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

До 1927 г. взаимодействие между атомными системами и электромагнитным полем рассматривалось полуклассически, т. е. атомные системы трактовались как квантовые, а электромагнитное поле — по Максвеллу, т. е. классически. При этом сохранялось основное противоречие: интерференция света объяснялась его классическими волновыми свойствами, а поглощение и испускание света — его квантовыми свойствами. Далее, если поглощение и индуцированное испускание света можно еще было трактовать как взаимодействие электромагнитного поля с атомом, то спонтанное испускание света не находило себе объяснения, потому что возбужденное состояние изолированного атома рассматривалось в квантовой механике как стационарное, т. е. существующее сколько угодно долго.

Очевидно, что последовательная теория взаимодействия атома с электромагнитным излучением требует, чтобы последнее тоже рассматривалось как квантовая система.

Впервые такой последовательный подход был осуществлен П. А. М. Дираком [105] и в несколько иной форме П. Йорданом и В. Паули [106]. При этом рассматривалось свободное электромагнитное поле, т. е. поле без источников. Квантование поля с источниками было выполнено в работах В. Гейзенберга и В. Паули [107]. Дальнейшее развитие теория получила в работах О. Клейна, В. Гейзенберга, В. Фока, Л. Розенберга, Л. Ландау и Р. Пайерлса и др.

Было бы совершенно невозможно излагать, даже кратко, основные результаты всех этих работ. К счастью, имеется превосходный обзор по квантовой теории излучения Э. Ферми [108], который подытоживает основные результаты теории. Мы будем придерживаться этого обзора. Первая часть обзора называется «Дираковская теория излучения».

Ферми предлагает представить себе ситуацию с помощью следующей простой механической модели. Имеется маятник (атом), струна (поле) и связывающая их пружина (взаимодействие). Если вначале колеблется только маятник, его энергия посредством пружины передается струне. Такой механический процесс — аналог испускания света атомом. В противоположном случае, когда колеблется струна, ее энергия может передаваться маятнику, — это соответствует процессу поглощения света атомом. Очевидно,

что все три элемента: атом, поле и взаимодействие должны рассматриваться с единой квантово-механической точки зрения.

Произвольное электромагнитное поле определяется векторным потенциалом $A(x, y, z, t)$ и скалярным потенциалом $\varphi(x, y, z, t)$.

В случае свободного излучения (без источников) можно положить $\varphi=0$ и тогда напряженности электрического и магнитного полей равны *)

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad H = \text{rot } A. \quad (1.1)$$

Плоская стоячая электромагнитная волна описывается векторным потенциалом

$$A = \epsilon u(t) \sin [(2\pi\nu/c) \mathbf{x}r + \beta]. \quad (1.2)$$

Здесь ϵ — единичный вектор в направлении электрического поля, $u(t)$ — функция времени (обычно периодическая**), \mathbf{x} — единичный вектор, перпендикулярный фазовой плоскости (известно, что $\epsilon \perp \mathbf{x}$), ν — частота волны и c — ее скорость в вакууме, $r = (x, y, z)$ — радиус-вектор, β — постоянная фазы.

Произвольное поле излучения, заключенное в конечный замкнутый объем Ω , может быть разложено по плоским волнам (1.2), т. е. в ряд Фурье. Векторный потенциал поля излучения равен

$$A = \sum_s \epsilon_s u_s(t) \sin \Gamma_s, \quad (1.3)$$

где

$$\Gamma_s = (2\pi\nu_s/c) (\mathbf{x}_s r) + \beta_s. \quad (1.3a)$$

Известно, что число таких стоячих колебаний в интервале частот от ν_s до $\nu_s + d\nu_s$ равно

$$(8\pi/c^3) \Omega \nu_s^2 d\nu_s. \quad (1.4)$$

Вычислим электромагнитную энергию, соответствующую такому полю стоячих волн; она равна

$$W_e = (\Omega/8\pi) (\overline{E^2} + \overline{H^2}),$$

где черта означает усреднение полей по объему Ω . Из (1.1) и (1.3) следует, что

$$E = -\sum_s (1/c) \epsilon_s \dot{u}_s \sin \Gamma_s, \quad H = \sum_s (2\pi\nu_s/c) [\mathbf{x}_s \epsilon_s] u_s \cos \Gamma_s. \quad (1.5)$$

Легко понять, что так как при усреднении $\left(\sum_s\right)^2$ средние от смешанных членов равны нулю, $\overline{\sin^2 \Gamma_s} = \overline{\cos^2 \Gamma_s} = 1/2$ и $[\mathbf{x}_s \epsilon_s]^2 = 1$ (\mathbf{x}_s и ϵ_s — единичные взаимно перпендикулярные векторы), то получим

$$\overline{E^2} = (1/2c^2) \sum_s \dot{u}_s^2, \quad \overline{H^2} = \sum_s (2\pi^2 \nu_s^2 / c^2) u_s^2.$$

*) См. любой курс электродинамики.

**) Если имеется атом, способный испускать или поглощать энергию, то амплитуда стоячей волны может возрастать или убывать.

Таким образом, электромагнитная энергия равна

$$W_e = (\Omega/8\pi c^2) \sum_s [(1/2) \dot{u}_s^2 + 2\pi^2 v_s^2 u_s^2]. \quad (1.6)$$

Введем теперь вместо u_s и \dot{u}_s независимые динамические переменные q_s и p_s , положив их равными

$$u_s = (8\pi c^2/\Omega)^{1/2} q_s, \quad \dot{u}_s = (8\pi c^2/\Omega)^{1/2} p_s, \quad (1.7)$$

тогда электромагнитная энергия будет иметь вид

$$W_e = \sum_s [(1/2) p_s^2 + 2\pi v_s^2 q_s^2]. \quad (1.8)$$

Здесь каждое слагаемое в сумме представляет собой функцию Гамильтона для линейного гармонического осциллятора частоты v_s и массы, равной единице. Таким образом, q_s и p_s — канонические переменные осцилляторов, описывающих поле излучения.

Под атомной системой будем подразумевать оптический электрон атома. Функция Гамильтона этого электрона в нерелятивистском приближении равна [45]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_a &= (1/2m) [\mathbf{p} - (e/c) \mathbf{A}]^2 + eV = \\ &= (1/2m) p^2 + eV - (e/mc) (\mathbf{A}\mathbf{p}) + (e^2/2mc^2) A^2. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь \mathbf{p} — импульс электрона, m и e — его масса и заряд, V — электростатический потенциал поля атома, действующего на электрон, \mathbf{A} — как и раньше, векторный потенциал электромагнитной волны. Мы пренебрежем последним слагаемым порядка $1/c^2$ в правой части (1.9), тогда полная функция Гамильтона для электрона и поля излучения при сложении (1.8) и (1.9) будет равна

$$\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'. \quad (1.10)$$

Положим, что

$$\mathcal{H}_0 = (1/2m) p^2 + eV + \sum_s [(1/2) p_s^2 + 2\pi v_s^2 q_s^2] \quad (1.11)$$

— функция Гамильтона для электрона и поля излучения, а

$$\mathcal{H}' = - (e/m) (8\pi/\Omega)^{1/2} \sum_s (\epsilon_s \mathbf{p}) q_s \sin \Gamma_s \quad (1.12)$$

— энергия их взаимодействия; последнее видно из того, что (1.12) содержит динамические переменные \mathbf{p} и q_s , относящиеся к электрону и полю излучения; мы подставили вместо \mathbf{A} выражение (1.3) и заменили u_s на q_s , согласно (1.7).

Квантово-механическое решение задачи предусматривает замену динамических переменных операторами: $\mathbf{p} \rightarrow (\hbar/i) \nabla$ и $p_s \rightarrow (\hbar/i) \partial/\partial q_s$. Если мы учтем, что собственная функция гамильтониана, состоящая из суммы независимых членов, равна произведению собственных функций для этих независимых членов, то собственная функция гамильтониана $\mathcal{H}_0(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}, \hat{p}_s, q_s)$ равна

$$\psi_{n_1, \dots, n_s, \dots} = \Phi_n \Phi_{n_1} \dots \Phi_{n_s}, \quad (1.13)$$

где Φ_n — собственная функция электрона в изолированном атоме, находящемся в квантовом состоянии n , а Φ_{n_s} — собственная функция осциллятора частоты ν_s , находящегося в квантовом состоянии n_s .

Собственная энергия электрона в поле, описываемая собственной функцией (1.13), равна

$$E_{nn_1 \dots n_s \dots} = E_n + h\nu_1(n_1 + 1/2) + \dots + h\nu_s(n_s + 1/2) + \dots, \quad (1.14)$$

где E_n — энергия электрона в атоме, находящемся в квантовом состоянии n , а $h\nu_s(n_s + 1/2)$ — энергия осциллятора частоты ν_s , находящегося в квантовом состоянии n_s . В дальнейшем мы не будем в (1.14) учитывать нулевые энергии $h\nu_s/2$, так как в разностях энергий, которые у нас будут фигурировать, они выпадают.

Энергию взаимодействия \mathcal{H}' (1.12) мы учтем как возмущение. Мы воспользуемся теорией возмущения, зависящей от времени, и теорией квантовых переходов, развитых Дираком в 1926, 1927 гг. [80, раздел 29]. Сформулируем основные результаты теории, используемые в дальнейшем.

Пусть полный гамильтониан \mathcal{H} , подобно (1.10), состоит из невозмущенной части \mathcal{H}_0 и возмущения \mathcal{H}' . Собственные функции и собственные значения энергии невозмущенного гамильтониана \mathcal{H}_0 известны:

$$\mathcal{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n. \quad (1.15)$$

Решение полного гамильтониана \mathcal{H} ищем в виде разложения

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \psi_n e^{-2\pi i E_n t / h}, \quad (1.16)$$

где $a_n(t)$ — искомые коэффициенты.

Можно показать, что в первом приближении

$$\dot{a}_k = -(2\pi i / h) \sum_n \mathcal{H}'_{kn} a_n(0) e^{2\pi i (E_k - E_n) t / h}. \quad (1.17)$$

Здесь матричные элементы

$$\mathcal{H}'_{kn} = \int \psi_k^* \mathcal{H}' \psi_n d\tau. \quad (1.17a)$$

Можно также показать, что вероятность перехода $n \rightarrow k$ в единицу времени равна

$$w_{nk} = (4\pi^2 / h) |\mathcal{H}'_{kn}|^2 \delta(E_k - E_n). \quad (1.18)$$

В нашем случае \mathcal{H}' равно (1.12), а ψ_n равно (1.13), поэтому матричный элемент для перехода $nn_1 \dots n_s \dots \rightarrow mn_1 \dots m_s \dots$ равен

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_{mm_1 \dots m_s \dots; nn_1 \dots n_s \dots} = & \int \Phi_m^* \Phi_{m_1} \dots \Phi_{m_s} \dots \left[-\frac{e}{m} \left(\frac{8\pi}{\Omega} \right)^{1/2} \times \right. \\ & \left. \times \sum_s (E_s \hat{p}) q_s \sin \Gamma_s \right] \Phi_n \Phi_{n_1} \dots \Phi_{n_s} \dots dq_s d^3 r. \quad (1.19) \end{aligned}$$

Здесь dq_s — произведение дифференциалов всех «координат» осцилляторов поля, $d^3r = dx dy dz$ — произведение декартовых координат электрона.

Так как осцилляторные функции поля ортонормированы, то

$$\int \Phi_{m\alpha} \Phi_{n\alpha} dq_\alpha = \delta_{n\alpha m\alpha}.$$

С другой стороны, матричные элементы

$$\int q_s \Phi_{n_s} \Phi_{m_s} dq_s = \begin{cases} 0 & \text{при } m_s \neq n_s \pm 1, \\ [h(n_s + 1)/8\pi^2 v_s]^{1/2} & \text{при } m_s = n_s + 1, \\ [hn_s/8\pi^2 v_s]^{1/2} & \text{при } m_s = n_s - 1, \end{cases} \quad (1.20)$$

что совпадает с матричными элементами координаты осциллятора (см. [56, § 48]). Далее, введем матричный элемент, равный

$$P_{smn} = \int \Phi_m^* \sin \Gamma_s \hat{p} \Phi_n d^3r = \frac{h}{2\pi i} \int \Phi_m^* \sin \Gamma_s \text{grad} \Phi_n dx dy dz. \quad (1.21)$$

Рассмотрим важный случай, когда длина волны света много больше размеров атома; в этом случае $\sin \Gamma_s$ можно вынести из-под знака интеграла, тогда

$$P_{smn} = \frac{h}{2\pi i} \sin \Gamma_s \int \Phi_m^* \text{grad} \Phi_n dx dy dz = -2\pi i m v_{mn} r_{mn} \sin \Gamma_s, \quad (1.22)$$

как это следует из общей формулы для вычисления матричного элемента импульса p_{mn} (см. [56, § 48]); здесь m — масса электрона, r_{mn} — матричный элемент радиус-вектора электрона и $v_{mn} = (E_m - E_n)/h$ — частота перехода $n \rightarrow m$ в атоме.

Используя (1.20) и (1.22), получим для матричного элемента (1.19) выражение

$$\mathcal{H}'_{m_1 \dots n_s \pm 1 \dots; n_1 \dots n_s \dots} = 2\pi i e \left(\frac{h}{\pi \Omega} \right)^{1/2} \frac{v_{mn}}{v_s^{1/2}} (e_s r_{mn}) \Gamma_s \left(\frac{(n_s + 1)^{1/2}}{n_s^{1/2}} \right). \quad (1.23)$$

Мы видим, что матричный элемент, связанный с испусканием фотона, отличается от матричного элемента, связанного с поглощением фотона, только заменой $n_s^{1/2}$ на $(n_s + 1)^{1/2}$.

Теперь мы можем написать в явном виде уравнение (1.17) для коэффициентов $a_k(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{a}_{n_1 \dots n_s \dots} = & [4\pi^{3/2} e / (h\Omega)^{1/2}] \sum_{m,s} (v_{mn} / v_s^{1/2}) (e_s r_{mn}) \times \\ & \times \sin \Gamma_s [a_{m_1 \dots n_s \pm 1 \dots} (n_s + 1)^{1/2} e^{-2\pi i (v_{mn} + v_s)t} + \\ & + a_{m_1 \dots n_s - 1 \dots} n_s^{1/2} e^{-2\pi i (v_{mn} - v_s)t}]. \quad (1.24) \end{aligned}$$

Это и есть основное уравнение теории излучения. Конечно, (1.24) потребует обобщения, если перейти к более высокой степени приближения или применить последнее уравнение к атомным системам, содержащим более одного оптически активного электрона.

Можно рассмотреть черное излучение, находящееся в равновесии с атомами газа, способными совершать только переходы между двумя состояниями: $m \rightleftharpoons n$ (не рассмотренному Ферми). Исходя из выражения для вероятности перехода (1.18) и выражения для \mathcal{H}' (1.23), представляется весьма естественным, что отношение вероятности излучения $w_{\text{изл}}$ к вероятности поглощения $w_{\text{погл}}$ равно

$$w_{\text{изл}}/w_{\text{погл}} = (\bar{n}_{\nu_s} + 1)/\bar{n}_{\nu_s}, \quad (1.25)$$

где $\nu_s = (E_m - E_n)/h$, а \bar{n}_{ν_s} — равновесное число фотонов с энергией $h\nu_s$ в единице объема, так что спектральная плотность излучения $\rho_{\nu_s} = \bar{n}_{\nu_s} h\nu_s$.

Выражение (1.25) соответствует гипотезе Эйнштейна о спонтанном и индуцированном излучениях; в самом деле, вероятность излучения $w_{\text{изл}}$ пропорциональна двум слагаемым, из которых одно пропорционально \bar{n}_{ν_s} , т. е. плотности излучения ρ_{ν_s} , поэтому, используя (1.25), можно вывести формулу Планка. Действительно, по Больцману, числа атомов в состояниях m и n пропорциональны $\exp(-E_m/kT)$ и $\exp(-E_n/kT)$; тогда из принципа детального равновесия следует, что

$$e^{-E_m/kT} w_{\text{изл}} = e^{-E_n/kT} w_{\text{погл}}. \quad (1.26)$$

Исключая из (1.25) и (1.26) отношение $w_{\text{изл}}/w_{\text{погл}}$, получим

$$\bar{n}_{\nu_s} = 1/(e^{h\nu_s/kT} - 1),$$

т. е. формулу Планка.

Ферми рассматривает следующие примеры на применение основного уравнения (1.24):

1. Излучение возбужденного атома и среднее время его жизни.
2. Распространение света в вакууме.
3. Случай интерференции: картина Липмана.
4. Эффект Доплера.
5. Эффект Комптона.

Рассмотрим первый из этих примеров. Пусть атом имеет только два уровня энергии, между которыми возможны переходы $1 \rightleftharpoons 2$. В начальный момент времени $t=0$ атом находится в возбужденном состоянии «2» и поле излучения отсутствует ($n_s=0$), тогда

$$a_{200\dots 0\dots} = 1,$$

а все остальные a равны нулю. Обозначая

$$(E_2 - E_1)/h = \nu_{21} = -\nu_{12} = \nu, \quad r_{12} = r_{21} = r, \quad (1.27)$$

получим для $a_{10\dots 1_s\dots}$ из (1.24) уравнение

$$\dot{a}_{10\dots 1_s\dots} = [4\pi^3/2 e/(\Omega h)^{1/2}] (\nu/\nu_s^{1/2}) (e_s r) \sin \Gamma_s a_{100\dots 0} \times \\ \times \exp(-2\pi i(\nu - \nu_s)t). \quad (1.28)$$

Здесь учтено только испускание фотона ($n_s + 1 = 0 + 1 = 1$).

Для того чтобы получить замкнутую систему уравнений, мы должны рассмотреть и обратный процесс: поглощение атомом фотона; в этом случае $a_{20\dots 0\dots}(0) = 0$ и

$$\dot{a}_{20\dots 0\dots} = [4\pi^{3/2}e/(\Omega\hbar)^{1/2}] \sum_s (v/v_s^{1/2}) (\mathbf{e}_s \mathbf{r}) \sin \Gamma_s a_{100\dots 1_s\dots} \times \\ \times \exp(-2\pi i(v_s - v)t). \quad (1.29)$$

Попытаемся решить уравнения (1.28) и (1.29) посредством подстановки

$$a_{20\dots 0\dots} = \exp(-\gamma t), \quad (1.30)$$

где γ — константа, подлежащая определению. Подставляя (1.30) в правую часть (1.28), интегрируя по t и учитывая начальное условие $a_{100\dots 1_s\dots}(0) = 0$, получим

$$a_{10\dots 1_s\dots} = \frac{4\pi^{3/2}e}{(\Omega\hbar)^{1/2}} \frac{v}{v_s^{1/2}} (\mathbf{e}_s \mathbf{r}) \sin \Gamma_s \frac{e^{[-2\pi i(v-v_s)-\gamma]t} - 1}{-2\pi i(v-v_s) - \gamma}. \quad (1.31)$$

Подставляя теперь (1.30) в левую, а (1.31) — в правую часть (1.29), найдем значение, равное

$$\gamma = \frac{16\pi^3 e^2}{\Omega\hbar} \sum_s \frac{v^2}{v_s} (\mathbf{e}_s \mathbf{r})^2 \sin^2 \Gamma_s \frac{1 - e^{[\gamma - 2\pi i(v_s - v)]t}}{2\pi i(v - v_s) + \gamma}. \quad (1.32)$$

Так как фазы, направления и поляризации волн излучения распределены хаотически, то мы введем средние значения: $(\mathbf{e}_s \mathbf{r})^2 = (1/3)\bar{r}^2$ и $\sin^2 \Gamma_s = 1/2$; после этого \sum_s может быть вычислена ведением «весового» множителя (1.4) и интегрированием по v_s . В результате получим

$$\gamma = \frac{64\pi^4 e^2}{3hc^3} v^2 \bar{r}^2 \int_0^\infty \frac{1 - \exp[\gamma - 2\pi i(v_s - v)]t}{2\pi i(v - v_s) + \gamma} v_s dv_s.$$

Можно показать, что для малых значений γ ($\gamma \rightarrow 0$) интеграл равен $v/2$, поэтому

$$\gamma = (32\pi^4 e^2 / 3hc^3) v^3 \bar{r}^2. \quad (1.33)$$

Легко определить связь константы γ со средним временем жизни состояния 2. Вероятность в момент времени t атому находиться в состоянии 2, согласно (1.30), равна

$$|a_{200\dots 0\dots}|^2 = \exp(-2\gamma t).$$

Она же, по определению среднего времени жизни τ , равна $\exp(-t/\tau)$; сравнивая, получаем, что среднее время жизни состояния 2 равно

$$\tau = 1/2\gamma = 3hc^3 / 64\pi^4 e^2 v^3 \bar{r}^2. \quad (1.34)$$

Здесь, как следует из вывода, \bar{r}^2 — среднеквадратичный размер атома.

Мы можем также из нашей теории получить форму и ширину линий испускания. Очевидно, что для $t \gg \tau$ экспонента в (1.31) равна нулю, поэтому

$$|a_{100\dots 1_s\dots}|^2 = \frac{16\pi^3 e^2}{\Omega \hbar} \frac{v^2}{v_s} (e_s r)^2 \sin^2 \Gamma_s \frac{1}{\gamma^2 + 4\pi^2 (v_s - v)^2}. \quad (1.35)$$

Здесь v_s — частота испущенной линии, а $v = (E_2 - E_1)/\hbar$. Последний множитель

$$\frac{1}{\gamma^2 + 4\pi^2 (v_s - v)^2} \quad (1.35a)$$

определяет форму испущенной атомом линии. Его значение совпадает с классическим значением для затухающего осциллятора.

В двух следующих частях обзора Ферми рассматривает вопросы:

1. Распространение света в вакууме.

2. Интерференция падающего и отраженного от зеркала света (картина Липмана).

Метод рассмотрения этих вопросов весьма сходен с изложенным выше; поэтому мы ограничимся указанием на постановку вопроса и обсуждением результатов.

Для исследования этих вопросов вводятся в рассмотрение два одинаковых атома: A — испускающий и B — поглощающий свет. Пусть в начальный момент времени $t=0$, атом A находится в возбужденном состоянии 2, а атом B — в нормальном состоянии 1. Через малый промежуток времени атом A испускает фотон, который может быть поглощен атомом B . Пусть $|a_{n'n_1\dots n_s\dots}|^2$ — вероятность того, что атом A находится в квантовом состоянии n , а атом B — в состоянии n' ; вообще величины, относящиеся к атому B , мы будем снабжать штрихами.

Можно составить уравнение для $a_{n'n_1\dots n_s\dots}$, подобное (1.24).

Действуя после этого аналогично тому, как при исследовании испускания света атомом, получим следующие результаты. Для момента времени $t < r/c$, где r — расстояние между атомами, вероятность поглощения атомом B испущенного атомом A фотона ($|a_{120\dots 0\dots}|^2$) равна нулю. Если же $t > r/c$, она равна

$$|a_{120\dots 0\dots}|^2 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{16\pi^3 e^2}{c^2 \hbar} v r v' r' \right)^2 \frac{1}{\gamma^2 + 4\pi^2 (v' - v)^2}. \quad (1.36)$$

Здесь v , r и v' , r' — величины, аналогичные (1.27), относящиеся к атомам A и B ; константа затухания γ равна (1.33). Мы видим, что вероятность становится отличной от нуля только при $t > r/c$ и что она обратно пропорциональна r^2 . Оба эти утверждения совпадают с выводами классической теории.

Рассмотрим картину, возникающую при интерференции падающего на зеркало света с отраженным (картина Липмана). Проведем ось x перпендикулярно к плоскости зеркала S и выберем начало координат на зеркале. Пусть атом B (поглотитель)

расположен на оси x на расстоянии x' , а атом A (эмиттер) — на той же оси на расстоянии $x \gg x'$, так что волны, падающие на зеркало S есть узловая плоскость стоячих волн, можно, действуя, как в предыдущем случае, вычислить амплитуду вероятности $a_{120\dots 0\dots}$ того, что атом A испустил фотон, а атом B поглотил его. Можно показать, что для момента времени $t < (x-x')/c$ эта амплитуда вероятности равна нулю, а для $t > (x-x')/c$ она равна

$$a_{120\dots 0\dots} = \frac{8i\pi^2 e^2}{c^2 \hbar} \frac{v\bar{r}v'\bar{r}}{-2\pi i(v'-v) + \gamma} \left[\frac{1}{x-x'} e^{2\pi i v'(x-x')/c} - \frac{1}{x+x'} e^{2\pi i v'(x+x')/c} \right], \quad (1.37)$$

где нештрихованные и штрихованные величины для атомов A и B имеют смысл (1.27). Легко видеть, что если фазы экспонент совпадают, точнее,

$$(2\pi v'/c)(x-x') = (2\pi v'/c)(x+x') - 2\pi n, \quad (1.38)$$

где n — целое число, то экспонента может быть вынесена за квадратную скобку и последняя становится порядка x'/x^2 , т. е. мала; следовательно, амплитуда вероятности $a_{120\dots 0\dots}$ тоже мала. Из (1.38) вытекает, что

$$x' = (n/2)c/v' = n(\lambda'/2), \quad (1.38a)$$

где $\lambda' = c/v'$ — длина волны, соответствующая частоте v' . Отсюда видно, что в параллельных зеркалу S плоскостях, отстоящих друг от друга на расстояния $\lambda'/2$, вероятность поглощения света (а следовательно, его интенсивность) минимальна. Очевидно, между этими плоскостями расположены на равных расстояниях параллельные им плоскости, на которых интенсивность света будет максимальна. Эта картина соответствует той, которая получается для интерференции света из волновой теории.

2. НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА СПИНА ЭЛЕКТРОНА

В 1927 г. В. Паули сделал принципиальный шаг в направлении расширения границ применимости нерелятивистской квантовой механики, простояв в ее рамках двухкомпонентную волновую функцию, описывающую спин электрона [109].

В начале своей статьи Паули отмечает, что для объяснения сложной структуры атомных спектров и аномального эффекта Зеемана С. Гаудсмит и Дж. Уленбек (1925 г.) предположили, что электрон обладает собственным механическим моментом (моментом импульса), проекция которого на фиксированное направление равна $s_z = \pm \hbar/4\pi = \pm (1/2) \hbar$, и магнитным моментом, равным магнетону Бора $\mu_B = e\hbar/4\pi mc = e\hbar/2mc = (e/mc)s_z$; причем отношение $\mu_B/s_z = e/mc$, т. е. имеет аномальное значение, вдвое большее, чем в случае орбитального движения электрона.

В. Гейзенберг и П. Иордан пытались ввести эту гипотезу в квантовую механику на основе метода матриц, но столкнулись при этом с рядом своеобразных затруднений. Ч. Дарвин пытался учесть указанные особенности электрона, рассматривая ψ -функцию как векторную величину, но тоже не достиг какого-либо успеха.

Успеха можно достичь, если, наряду с пространственными координатами электрона x, y, z , ввести в волновую функцию переменную s_z , так что $\psi = \psi(x, y, z, t, s_z)$, где $s_z = + (1/2)\hbar$ или $-(1/2)\hbar$. Но тогда можно вместо одной волновой функции ввести две: $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ и $\psi_\beta(x, y, z, t)$, где индексы α и β соответствуют $s_z = + (1/2)\hbar$ и $s_z = - (1/2)\hbar$. Обозначая совокупность координат x, y, z буквой q , можно сказать, что $\psi_\alpha(q, t) dq$ — вероятность того, что в момент времени t координаты лежат между q и $q + dq$ и $s_z = + (1/2)\hbar$; аналогичный смысл имеет $\psi_\beta(q, t)$. Полагая волновые функции ортонормированными, имеем

$$\int (|\psi_\alpha|^2 + |\psi_\beta|^2) dq = 1, \quad (2.1)$$

$$\int (\psi_{\alpha,n} \psi_{\alpha,m}^* + \psi_{\beta,n} \psi_{\beta,m}^*) dq = 0 \text{ для } n \neq m. \quad (2.2)$$

Здесь n и m обозначают два различных квантовых состояния электрона, а звездочка — комплексно-сопряженную величину.

Обозначим операторы спина через $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z^*$). Мы подчиним их перестановочным соотношениям, имеющим место для орбитального момента импульса, т. е.

$$[\sigma\sigma] = i\hbar\sigma, \quad \sigma^2 = \hbar^2 s(s+1) \text{ при } s = 1/2. \quad (2.3)$$

Здесь, к примеру, $[\sigma\sigma]_x = \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y$ и аналогично для других составляющих. Позже Паули показал, что эти соотношения можно писать не только по аналогии, но что они вытекают из общих положений теории групп [110, с. 181].

В дальнейшем представляется более удобным пользоваться безразмерными операторами $s = \sigma/(1/2)\hbar$; в этом случае перестановочные соотношения (2.3) приобретают вид

$$s_y s_z - s_z s_y = 2i s_x, \quad s_z s_x - s_x s_z = 2i s_y, \quad s_x s_y - s_y s_x = 2i s_z, \\ s^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = 3, \quad (2.4)$$

где 3 представляет собой единичный оператор, умноженный на 3. Если под оператором s понимать матрицу, то, в силу двужначности значений спина, она должна быть второго ранга. В представлении, когда s_z диагонально, эти матрицы имеют вид

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Мы выбрали собственные значения оператора s_z равными $+1$ и -1 , т. е. значения оператора σ_z равными $+(1/2)\hbar$ и $-(1/2)\hbar$.

*) Мы, подобно Паули, обозначаем операторы жирным шрифтом.

Матрицы s_x и s_y определяются из требования, чтобы они удовлетворяли соотношениям (2.4). Выражения (2.5) получили название матриц Паули.

Паули замечает (его внимание на это обратил Иордан), что в силу двухрядности матриц (2.5) они дополнительно к условиям (2.4) удовлетворяют соотношениям

$$s_x s_y = -s_y s_x = i s_z, \quad s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = 1, \quad (2.6)$$

т. е. операторы s_x, \dots антикоммутируют и их квадраты равны 1.

Если операторы спина изображаются матрицами (2.5), то для определения их действия на волновые функции, последние тоже должны изображаться матрицами. Если мы пренебрежем взаимодействием между спином электрона и его орбитальным движением, то

$$\psi_\alpha = \psi(q, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_\beta = \psi(q, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где спиновая волновая функция в виде двухрядной матрицы $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ соответствует спину, направленному «вверх», а матрицы $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ — спину, направленному «вниз». Тогда, например,

$$s_y(\psi_\alpha) = \psi(q, t) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi(q, t) i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i\psi_\beta.$$

Нетрудно также проверить, что

$$\begin{aligned} s_x(\psi_\alpha) &= \psi_\beta, & s_x(\psi_\beta) &= \psi_\alpha, \\ s_y(\psi_\alpha) &= i\psi_\beta, & s_y(\psi_\beta) &= -i\psi_\alpha, \\ s_z(\psi_\alpha) &= \psi_\alpha, & s_z(\psi_\beta) &= -\psi_\beta. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Паули определяет оператор s_y так: $s_y(\psi_\alpha) = -i\psi_\beta$ и $s_y\psi_\beta = +i\psi_\alpha$; это создает ряд неоправданных, ненужных затруднений; мы будем придерживаться определения (2.8).

В § 3 Паули рассматривает поведение функций ψ_α и ψ_β при вращении координатной системы x, y, z . Выясняется, что двухкомпонентная волновая функция не ведет себя подобно вектору; в частности, при вращении вокруг некоторой оси на угол 2π , она не возвращается к прежнему значению, а меняет свой знак. Развитие этих идей положило начало спинорному анализу.

Паули показывает, что результаты, полученные при специальном выборе координатной системы (выделение оси z ; см. (2.5)), на самом деле от этого не зависят. Если функция Гамильтона зависит от спина (или магнитного момента) электрона: $\mathcal{H}(p, q, s_x, s_y, s_z)$, то для получения гамильтониана надо заменить $p_h \rightarrow (\hbar/i) \partial q_h$ и $s_x \rightarrow s_x, \dots$, согласно (2.5).

Паули заменяет уравнение Шредингера на два уравнения для собственных функций ψ_α и ψ_β :

$$\mathcal{H}[(\hbar/i) \partial / \partial q, q, s_x, s_y, s_z] \psi_\alpha = E \psi_\alpha, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{H}[(\hbar/i) \partial / \partial q, q, s_x, s_y, s_z] \psi_\beta = E \psi_\beta.$$

Далее он рассматривает следующий пример: покоящийся электрон в однородном магнитном поле напряженности $\mathbf{H} \equiv \{H_x, H_y, H_z\}$. Энергия такого электрона равна $\pm \mu_B \mathbf{H}$, где μ_B — магнетон Бора.

Операторы собственного магнитного момента электрона равны $\mu_B s$, где составляющие s равны (2.5). Таким образом, уравнения Паули (2.9) для собственных функций ψ_α и ψ_β имеют вид

$$\mu_B (H_x s_x + H_y s_y + H_z s_z) \psi_\alpha = E \psi_\alpha, \quad (2.10)$$

$$\mu_B (H_x s_x + H_y s_y + H_z s_z) \psi_\beta = E \psi_\beta.$$

Используя (2.8), получим

$$(\mu_B H_z - E) \psi_\alpha + \mu_B (H_x + iH_y) \psi_\beta = 0, \quad (2.11)$$

$$\mu_B (H_x - iH_y) \psi_\alpha - (\mu_B H_z + E) \psi_\beta = 0.$$

Эта система однородных линейных уравнений для ψ_α и ψ_β имеет решения, отличные от нулевых только в том случае, если определитель системы (2.11) равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \mu_B H_z - E & \mu_B (H_x + iH_y) \\ \mu_B (H_x - iH_y) & -(\mu_B H_z + E) \end{vmatrix} = 0.$$

Отсюда

$$E = \pm \mu_B (H_x^2 + H_y^2 + H_z^2)^{1/2} = \pm \mu_B |\mathbf{H}|. \quad (2.12)$$

Мы видим, что магнитный момент электрона μ_B «подстраивается» к полю \mathbf{H} , выделяя фиксированное в пространстве направление.

Пусть теперь поле \mathbf{H} образует с осью z угол ϑ . Чему равны $|\psi_\alpha|$ и $|\psi_\beta|$? Используя одно из уравнений (2.11), значение (2.12) и условие нормировки $|\psi_\alpha|^2 + |\psi_\beta|^2 = 1$ (волновая функция не зависит от x, y, z), получим

$$|\psi_\alpha|^2 = \cos^2(\vartheta/2), \quad |\psi_\beta|^2 = \sin^2(\vartheta/2). \quad (2.13)$$

В самом деле, из первого уравнения (2.11) и значения (2.12) находим

$$(H \sin \vartheta \cos \varphi + iH \sin \vartheta \sin \varphi) \psi_\beta = H (1 - \cos \vartheta) \psi_\alpha,$$

где φ — полярная координата (долгота); отсюда

$$\sin^2 \vartheta |\cos \varphi + i \sin \varphi|^2 |\psi_\beta|^2 = (1 - \cos \vartheta)^2 |\psi_\alpha|^2.$$

Используя условие нормировки, получим (2.13). Соотношения (2.13) соответствуют общим выражениям, полученным Паули при исследовании поведения двухкомпонентной волновой функции $(\psi_\alpha, \psi_\beta)$ при вращении координатной системы.

3. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОНА

В 1928 г. английский теоретик П. А. М. Дирак опубликовал статью под названием «Квантовая теория электрона» [111]; она сыграла выдающуюся роль в развитии квантовой теории.

В начале статьи Дирак пишет:

«Новая механика, примененная к проблеме структуры атома с точечно-заряженным электроном, не дает результатов, согласующихся с опытом. Расхождение заключается в некоторой «двузначности» явлений — наблюдаемое число стационарных состояний электрона в атоме вдвое больше даваемых теорией. Для устранения этой трудности Гаудсмит и Уленбек высказали идею о существовании у электрона углового момента, равного половине \hbar -кванта, и магнитного момента, равного магнетону Бора. Эта модель электрона была введена в новую квантовую механику Паули и Дарвиним, которые смогли таким образом объяснить в первом приближении экспериментальные данные о спектре водородоподобных атомов.

Остается вопрос, почему Природе надо было выбрать такую модель электрона, вместо того чтобы удовлетвориться точечным зарядом. Мы найдем некоторую незавершенность в предыдущих методах применения квантовой механики к точечно-заряженному электрону, после устранения которых полностью проявляется двузначность явлений, наблюдаемых на опыте. В настоящей статье будет показано, что эта незавершенность связана с неучетом релятивизма и некоторых общих положений теории преобразований в квантовой механике».

Рассмотрим первую часть статьи.

§ 1. Более ранние трактовки относительности

Классическая релятивистская функция Гамильтона \mathcal{H} точечного заряда $-e$, движущегося в поле скалярного потенциала A_0 и векторного потенциала $\mathbf{A} \equiv \{A_x, A_y, A_z\}$, определяется из выражения

$$F \equiv -[\mathcal{H}/c + (e/c) A_0]^2 + [\mathbf{p} + (e/c) \mathbf{A}]^2 + m_0^2 c^2 = 0, \quad (3.1)$$

где \mathbf{p} и m_0 — импульс и масса покоя электрона, а c — скорость света в вакууме. Как было впервые предположено Шредингером, а затем Гордоном, Фоком и Клейном, волновое уравнение, соответствующее выражению (3.1), может быть получено, если ввести операторы

$$\mathcal{H} = W \rightarrow i\hbar \partial/\partial t, \quad p_r = -i\hbar \partial/\partial x_r, \quad (r=1, 2, 3). \quad (3.2)$$

Волновое уравнение имеет тогда вид

$$F\psi = \{-[i\hbar \partial/c\partial t + (e/c) A_0]^2 + \sum_r [-i\hbar \partial/\partial x_r + (e/c) A_r]^2 + m_0^2 c^2\} \psi = 0, \quad (3.3)$$

где $\psi = \psi(x_1, x_2, x_3, t)$ — волновая функция, зависящая от координат и времени.

Из волнового уравнения (3.3) и ему сопряженного можно получить уравнение непрерывности, связывающее производную по времени от «плотности» с дивергенцией «тока». Дирак видит первый недостаток уравнения (3.3) в том, что оно приводит к «плотности» вероятности, которая может быть отрицательна и, следовательно, не поддается физической интерпретации [110]. Вторым недостатком уравнения (3.3) Дирак видит в том, что оно второго порядка от производной по времени; это значит, что для определения ψ надо знать ψ и $\partial\psi/\partial t$ в начальный момент времени. Дирак считает, что это противоречит общим принципам квантовой механики.

§ 2. Гамильтониан в отсутствие поля

Уравнение (3.3) в отсутствие поля ($A_0 = A = 0$) имеет вид

$$(-p_0^2 + p^2 + m_0^2 c^2) \psi = 0, \quad (3.4)$$

где для релятивистской симметрии введена четвертая к p_r ($r=1, 2, 3$) составляющая $p_0 = W/c = i\hbar \partial / c \partial t = i\hbar \partial / \partial x_0$. Если мы теперь из общих соображений будем настаивать на том, чтобы p_0 входило в волновое уравнение в первой степени, то из соображений релятивистской инвариантности $p \equiv \{p_1, p_2, p_3\}$ тоже должны входить в волновое уравнение линейно.

Положим, что правильное релятивистское волновое уравнение имеет вид

$$(p_0 + \hat{\alpha}_1 p_1 + \hat{\alpha}_2 \bar{p}_2 + \hat{\alpha}_3 p_3 + \hat{\beta}) \psi = 0, \quad (3.5)$$

где $\hat{\alpha}_i$ и $\hat{\beta}$ — некоторые операторы. Операторы $\hat{\alpha}_i$, $\hat{\beta}$ не должны зависеть от переменных p_0 и p_r и действовать на них, так как это нарушило бы линейную зависимость от них гамильтониана (3.5); они не должны также зависеть и действовать на x_i ($i=1, 2, 3$), t , поскольку на электрон не действуют какие-либо внешние силы; они действуют на переменные, определяющие внутренние степени свободы электрона, аналогичные спиновой переменной s_z Паули; однако, коммутируя с p_μ ($\mu=0, 1, 2, 3$), x_i ($i=1, 2, 3$) и t , они могут не коммутировать друг с другом.

Умножим обе части уравнения (3.5) слева на $(-p_0 + \hat{\alpha}_1 p_1 + \hat{\alpha}_2 p_2 + \hat{\alpha}_3 p_3 + \hat{\beta})$; тогда получим (пишем для простоты α_i вместо $\hat{\alpha}_i$)

$$(-p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta) (p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta) \psi = 0,$$

или

$$\left[-p_0^2 + \sum \alpha_i^2 p_i^2 + \sum (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) p_1 p_2 + \beta^2 + \right. \\ \left. + \sum (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i \right] \psi = 0, \quad (3.6)$$

где \sum здесь и дальше означает циклическую перестановку индексов 1, 2, 3. Далее Дирак пишет, что это совпадает с (3.5), если

$$\alpha_r^2 = 1, \quad \alpha_r \alpha_s + \alpha_s \alpha_r = 0, \\ \beta^2 = m_0^2 c^2, \quad \alpha_r \beta + \beta \alpha_r = 0, \quad r \neq s, \quad r, s = 1, 2, 3.$$

Если же положить $\beta = \alpha_4 m_0 c$, то эти условия принимают вид

$$\alpha_\mu^2 = 1, \quad \alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 0 \quad (\mu \neq \nu), \quad \mu, \nu = 1, 2, 3, 4. \quad (3.7)$$

Фок и Ферми пишут проще: «Для того чтобы гамильтониан (3.6) совпадал бы с классической функцией Гамильтона, необходимо выполнение условий (3.7)».

Мы видим, что операторы α_μ антикоммутируют и их квадраты равны единичному оператору.

Если операторы α_μ изображать матрицами, то можно убедиться, что для удовлетворения (3.7) нужны матрицы не ниже четвертого ранга; поэтому, хотя три двухрядные матрицы Паули удовлетворяют условию (2.6), они не могут быть дополнены четвертой двухрядной матрицей с требуемыми свойствами (3.7).

Дирак поступает следующим образом: он строит шесть матриц четвертого ранга:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Легко показать, что матрицы σ_2 и ρ_2 удовлетворяют соотношениям

$$\sigma_r^2 = 1, \quad \sigma_r \sigma_s + \sigma_s \sigma_r = 0, \\ \rho_r^2 = 1, \quad \rho_r \rho_s + \rho_s \rho_r = 0, \quad r \neq s, \quad r, s = 1, 2, 3. \quad (3.9) \\ \rho_r \sigma_t = \sigma_t \rho_r,$$

Мы видим, что квадраты матриц σ_r и ρ_r равны единице, они коммутируют друг с другом, а между собой антикоммутируют, подобно матрицам Паули (2.6). Для последующего отметим еще, что

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3, \quad \rho_1 \rho_2 = -\rho_2 \rho_1 = i \rho_3, \quad (3.10)$$

а также соотношения, получаемые отсюда при циклической перестановке индексов 1, 2, 3.

Если мы теперь положим

$$\alpha_1 = \rho_1 \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_1 \sigma_2, \quad \alpha_3 = \rho_1 \sigma_3, \quad \alpha_4 = \rho_3, \quad (3.11)$$

то легко видеть, что условия (3.7) будут выполнены. Следует заметить, что матрицы ρ и σ — эрмитовы, так что матрицы α тоже

эрмитовы. Волновое уравнение (3.5) может быть записано в трехмерных векторных обозначениях:

$$[p_0 + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) + \rho_3 m_0 c] \psi = 0, \quad (3.12)$$

где $\boldsymbol{\sigma} \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ — вектор-оператор с составляющими (3.8).

Следующий § 3 посвящен доказательству инвариантности волнового уравнения (3.12) при преобразовании Лорентца. Дирак заканчивает этот параграф фразой: «Новое волновое уравнение может быть, таким образом, приведено к виду первоначального, так что результаты, полученные из исходного волнового уравнения, не зависят от используемой лорентцевской координатной системы».

§ 4. Гамильтониан для произвольного поля

Функция Гамильтона для электрона с зарядом $-e$ в поле скалярного потенциала A_0 и векторного потенциала \mathbf{A} получается из функции Гамильтона свободного электрона посредством замены $p_0 = W/c \rightarrow p_0 + (e/c)A_0$ и $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}$; поступая аналогично в уравнении (3.12), получим

$$\{[p_0 + (e/c)A_0] + \rho_1[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A})] + \rho_3 m_0 c\} \psi = 0. \quad (3.13)$$

Это уравнение, которое должно описывать все одноэлектронные явления, определяет четыре волновые функции ψ , которые могут быть записаны в виде четырехстрочной одностолбцовой матрицы. Заметим, что (3.13), аналогично (3.12), релятивистски инвариантно.

Для того чтобы вскрыть особенности уравнения (3.13) по сравнению с (3.3), умножим (3.13) слева на соответствующее выражение, аналогично (3.6); полагая $e' = (e/c)$, получим

$$0 = [- (p_0 + e' A_0) + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A})) + \rho_3 m_0 c] \{ [p_0 + e' A_0] + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A})) + \rho_3 m_0 c \} \psi = [- (p_0 + e' A_0)^2 + (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A}))^2 + m_0^2 c^2 + \rho_1 \{ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A})(p_0 + e' A_0) - (p_0 + e' A_0)\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A}) \}] \psi. \quad (3.14)$$

Воспользуемся формулой

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{C}) = \sum B_1 C_1 + \sum (\sigma_1 \sigma_2 B_1 C_2 + \sigma_2 \sigma_1 B_2 C_1) = \\ = (\mathbf{B}, \mathbf{C}) + i \sum \sigma_3 (B_1 C_2 - B_2 C_1) = (\mathbf{B}, \mathbf{C}) + i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{B}, \mathbf{C}],$$

где \mathbf{B} и \mathbf{C} — операторы, коммутирующие с $\boldsymbol{\sigma}$, но, вообще говоря, не коммутирующие друг с другом; положим в этой формуле $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{p} + e'\mathbf{A}$, тогда

$$(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} + e'\mathbf{A}))^2 = (\mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + \\ + i \sum \sigma_3 \{ (\rho_1 + e' A_1)(\rho_2 + e' A_2) - (\rho_2 + e' A_2)(\rho_1 + e' A_1) \};$$

так как ρ_1 и ρ_2 — дифференциальные операторы, то квадратная скобка под знаком суммы не равна нулю; учитывая, что $(\partial/\partial x)\mathbf{A} =$

$=A(\partial/\partial x) + \partial A/\partial x$, получим для суммы в правой части

$$i \sum \sigma_3 [\dots] = e\hbar(\sigma \operatorname{rot} A).$$

Аналогично может быть преобразована фигурная скобка в правой части (3.14); в результате найдем

$$0 = \{-(p_0 + e'A_0)^2 + (p + e'A)^2 + m_0^2 c^2 + e'\hbar(\sigma \operatorname{rot} A) - \\ - ie'\hbar\rho_1 [\sigma(\operatorname{grad} A_0 + (1/c)\partial A/\partial t)]\} \psi. \quad (3.15)$$

Последнее отличается от волнового уравнения (3.3) двумя членами:

$$(e\hbar/c)(\sigma H) + i(e\hbar/c)\rho_1(\sigma E), \quad (3.16)$$

где $H = \operatorname{rot} A$ — напряженность магнитного поля и $E = -\operatorname{grad} A_0 - (1/c)\partial A/\partial t$ — напряженность электрического поля. Эти два слагаемых, деленные на $2m_0$, можно рассматривать как дополнительную потенциальную энергию, обусловленную новыми внутренними степенями свободы электрона.

Первое слагаемое в потенциальной энергии (3.16) может быть представлено, как $(e\hbar/2m_0c)(\sigma H) = \mu_B(\sigma H)$. Матрица

$$\sigma = \begin{pmatrix} s & 0 \\ 0 & s \end{pmatrix},$$

где s — двухрядная матрица Паули (2.5), а 0 — двухрядная нулевая матрица. Можно показать, что $\mu_B\sigma$ — оператор спина электрона, соответствующий положительной и отрицательной энергиям решения уравнения Дирака. Второе слагаемое в (3.16) представляет собой энергию мнимого электрического диполя в электрическом поле и физического истолкования не имеет.

§ 5. Интегралы момента импульса для движения в поле центральных сил

Рассмотрим движение электрона в поле центральных сил. Мы положим $A = 0$ и $e'A_0 = V(r)$ — произвольная функция радиуса r . Гамильтониан (3.13) приобретает вид

$$-(\mathcal{H}/c) = V(r) + \rho_1(\sigma, p) + \rho_3 m_0 c, \quad (3.17)$$

где мы в случае стационарного решения положили $p_0 = \mathcal{H}/c = W/c$.

Если m — орбитальный момент импульса электрона,

$$m = [x p],$$

где x — радиус-вектор, то в обычной квантовой механике он удовлетворяет коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} m_1 x_1 - x_1 m_1 &= 0, & m_1 x_2 - x_2 m_1 &= i\hbar x_3, \\ m_1 p_1 - p_1 m_1 &= 0, & m_1 p_2 - p_2 m_1 &= i\hbar p_3, \\ [m m] &= i\hbar m, & m^2 m_1 - m_1 m^2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

и тем, которые вытекают отсюда при циклической перестановке индексов 1, 2, 3.

Легко показать, что в поле центральных сил

$$mV(r) - V(r)m = 0,$$

т. е. m коммутирует с $V(r)$, поэтому коммутатор m с гамильтонианом \mathcal{H} равен

$$\begin{aligned} (1/c)(m_1\mathcal{H} - \mathcal{H}m_1) &= \rho_1[m_1(\sigma, p) - (\sigma, p)m_1] = \\ &= \rho_1[m_1(\sigma_1p_1 + \sigma_2p_2 + \sigma_3p_3) - (\sigma_1p_1 + \sigma_2p_2 + \sigma_3p_3)m_1] = \\ &= \rho_1[\sigma_2(m_1p_2 - p_2m_1) + \sigma_3(m_1p_3 - p_3m_1)] = i\hbar\rho_1(\sigma_2p_3 - \sigma_3p_2), \end{aligned}$$

где мы воспользовались (3.18). Таким образом,

$$(1/c)(m\mathcal{H} - \mathcal{H}m) = i\hbar\rho_1(\sigma \times p). \quad (3.19)$$

Мы видим, что m не коммутирует с \mathcal{H} и поэтому не является интегралом движения. С другой стороны,

$$\begin{aligned} (1/c)(\sigma_1\mathcal{H} - \mathcal{H}\sigma_1) &= \rho_1(\sigma_1(\sigma, p) - (\sigma, p)\sigma_1) = \\ &= \rho_1[(\sigma_1\sigma - \sigma\sigma_1)p] = 2i\rho_1(\sigma_3p_2 - \sigma_2p_3), \end{aligned}$$

где мы воспользовались (3.10). Таким образом,

$$(1/c)(\sigma\mathcal{H} - \mathcal{H}\sigma) = -2i\rho_1(\sigma \times p). \quad (3.20)$$

Из (3.19) и (3.20) следует, что величина $m + (1/2)\hbar\sigma = M$ коммутирует с гамильтонианом \mathcal{H} и, следовательно, является интегралом движения. Мы видим, что момент импульса $(1/2)\hbar\sigma$, соответствующий внутренней степени свободы электрона, дополняет орбитальный момент импульса m до полного момента импульса M , сохраняющегося в поле центральных сил. Соотношения коммутации (3.18) при учете спина электрона оказываются справедливыми для полного момента импульса электрона, равного

$$M = m + (1/2)\hbar\sigma.$$

Последний § 6 статьи посвящен определению уровней энергии электрона в поле центральных сил. Для водородного атома Дирак получает в первом приближении поправки, совпадающие с теми, которые были ранее получены Дарвиним и Паули. Мы не будем приводить эти довольно громоздкие выкладки; читатель может ознакомиться с этим вопросом по книге [80, раздел 44].

Вторая часть статьи под тем же названием [112] посвящена законам сохранения, правилам отбора, относительной интенсивности мультиплетов и эффекту Зеемана.

В заключение этого раздела мы кратко изложим чрезвычайно плодотворную идею Дирака о позитронах, высказанную им в 1931 г. [113]. Вначале рассмотрим подробнее характер решений волнового уравнения (3.13). Для того чтобы уравнение имело смысл, необходимо, чтобы четырехрядные матрицы $\rho_1\sigma$ и ρ_3 действовали на четырехкомпонентную волновую функцию ψ . Мы бу-

дем представлять ее в виде одностолбцовой матрицы

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(r, t) \\ \psi_2(r, t) \\ \psi_3(r, t) \\ \psi_4(r, t) \end{pmatrix}; \quad (3.21)$$

тогда (3.13) эквивалентно четырем совместным дифференциальным уравнениям в частных производных первого порядка, которые линейны и однородны по четырем функциям $\psi_j(r, t)$ ($j=1, 2, 3, 4$).

При отсутствии поля ($A_0=0, \mathbf{A}=0$) для свободного электрона составляющие волновой функции имеют вид плоских волн:

$$\psi_j(r, t) = u_j \exp(i/\hbar)(\mathbf{p}\mathbf{r} - Wt). \quad (3.22)$$

Здесь амплитуда u_j , импульс \mathbf{p} и энергия W являются числами. Подставляя (3.22) в (3.21), а полученную одностолбцовую волновую функцию в (3.13), получим

$$\begin{aligned} (W + m_0c^2)u_1 + cp_3u_3 + c(p_1 - ip_2)u_4 &= 0, \\ (W + m_0c^2)u_2 + c(p_1 + ip_2)u_3 - cp_3u_4 &= 0, \\ (W - m_0c^2)u_3 + cp_3u_1 + c(v_1 - ip_2)u_2 &= 0, \\ (W - m_0c^2)u_4 + c(p_1 + ip_2)u_1 - cp_3u_2 &= 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Эти линейные однородные алгебраические уравнения для u_j имеют решения, отличные от нулевых, только в том случае, если определитель системы (3.23) равен нулю; расчет дает

$$(W^2 - c^2p^2 - m_0^2c^4)^2 = 0, \quad (3.24)$$

что соответствует классическому релятивистскому соотношению для свободной частицы между энергией W , импульсом \mathbf{p} и массой покоя m_0 .

Явные решения могут быть найдены при заданном импульсе для разных знаков энергии:

$$W_+ = +(c^2p^2 + m_0^2c^4)^{1/2}, \quad W_- = -(c^2p^2 + m_0^2c^4)^{1/2}.$$

При этом для каждого знака энергии W_+ и W_- решение двукратно вырождено; это вырождение связано с двумя возможными направлениями спина электрона по отношению к его импульсу \mathbf{p} . Для достаточно малых \mathbf{p} получим $W_+ - W_- = 2m_0c^2 = 10^6$ эВ.

Отрицательные значения W_- соответствуют отрицательной кинетической энергии электрона и его отрицательной массе покоя. Частицы с такими свойствами в природе не наблюдаются. Это же затруднение имеет место и в классической механике, поскольку в ней рассматривается соотношение (3.24). Однако в этом случае утверждается, что в классической теории все величины изменяются непрерывно, поэтому скачкообразный переход от энергии $+m_0c^2$ к $-m_0c^2$ невозможен; таким образом, если кинетическая энергия W частицы положительна, то она такой и останется. В квантовой теории, однако, возможны радиационные переходы из состояния $W > 0$ в состояние $W < 0$ с испусканием фотонов. Можно показать,

что вероятность таких переходов не мала, поэтому противоречие сохраняет полную силу.

Рассмотрим вопрос детальнее. Можно показать, что в уравнении (3.13) матрицы $\rho_1\sigma \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ легко выбрать вещественными, а матрицу ρ_3 — чисто мнимой; для этого достаточно поменять местами α_2 с ρ_3 . Допустим, что это сделано, и выпишем для стационарного состояния ($p_0 = W/c$) уравнение, комплексно-сопряженное с (3.13):

$$(W/c) \psi^\dagger = \{-\rho_1(\sigma(-\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A})) + \rho_3 m_0 c - (e/c)A_0\} \psi^\dagger.$$

Здесь учтено, что матрицы $\rho_1\sigma$ — вещественны, а ρ_3 и \mathbf{p} — чисто мнимы (мы после перестановки $\alpha_2 \rightleftharpoons \rho_3$ пользуемся старыми обозначениями); ψ^\dagger — однострочная четырехстолбцовая матрица, эрмитово-сопряженная с ψ . Поменяем знаки в обоих частях написанного равенства, тогда

$$-(W/c) \psi^\dagger = \{-\rho_1(\sigma(\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A})) - \rho_3 m_0 c + (e/c)A_0\} \psi^\dagger. \quad (3.25)$$

Это уравнение отличается от (3.13) (помимо замены ψ на ψ^\dagger) изменением заряда $e \rightarrow -e$ и энергии $W \rightarrow -W$.

Таким образом, можно предположить, что уравнение (3.13) для отрицательных энергий W , описывает движение частиц с положительной энергией, обладающих массой покоя электрона и положительным элементарным зарядом. К. Андерсон назвал такие частицы позитронами.

Осталось еще предотвратить спонтанные переходы электронов на отрицательные уровни энергии. С исключительной прозорливостью Дирак предположил, что отрицательные уровни энергии в вакууме полностью заполнены электронами. В этом случае принцип Паули запрещает переход на эти уровни других электронов. Предполагается, что заряд этих электронов каким-то образом нейтрализован. Если вырвать один электрон из этого «подвала» и перевести его в состояние с положительной энергией, то оставшаяся «дырка» будет вести себя, как позитрон. Вскоре позитроны были обнаружены на опыте (раздел 4).

Несмотря на то что физики были весьма привычны к необычным идеям и теориям, представления Дирака воспринимались с некоторым трудом. Даже такой выдающийся физик, как Паули, писал по поводу теории позитронов Дирака [110, с. 287]: «Мы не думаем, что намеченный таким образом путь мог быть серьезно принят во внимание».

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ ПОЗИТРОНОВ

1 сентября 1932 г. американский физик К. Андерсон направил в журнал «Science» [114] заметку под названием «Видимое существование легко отклоняемых положительных частиц». То, что Андерсон поместил эту заметку не в каком-либо известном научном журнале, а в популярном, свидетельствует о некоторой его неуверенности в собственном открытии; поэтому честь эксперимен-

тального открытия позитрона разделяют с К. Андерсоном, П. Блэккет и Дж. Оккиалини, работа которых обсуждена ниже.

Андерсон не приводит каких-либо фотографий или рисунков, а описывает и обсуждает наблюдаемые им треки частиц в магнитном поле в камере Вильсона, в которую вставлена горизонтальная пластинка свинца толщиной 6 мм. Попутно заметим, что магнитное поле в камере Вильсона впервые (1929 г.) использовал советский физик Д. В. Скобельцын, что существенно расширило экспериментальные возможности. Скобельцын первый наблюдал треки позитронов, однако в то время интерпретировать их как следы положительных частиц с массой порядка электронной не было оснований, и Скобельцын приписал наблюдаемые треки электронам, движущимся в противоположном направлении.

Андерсон описывает и обсуждает три фотографии. Так как выводы, к которым он приходит, во всех трех случаях одинаковы, мы ограничимся обсуждением одной первой фотографии. На ней имеется трек определенной кривизны над пластинкой свинца, который кончается на ней и продолжается с большей кривизной под пластинкой. Знак заряда частицы определяется, если известны направления ее движения и отклонение; он положителен для рассматриваемого трека, если частица движется сверху вниз. Очевидно, частица так и движется, поскольку кривизна трека над пластинкой меньше, чем под пластинкой, т. е. энергия частицы после прохождения пластинки уменьшилась. Длина трека, его кривизна и удельная ионизация вдоль него однозначно свидетельствуют о том, что мы имеем дело с легкой частицей, масса которой порядка массы электрона.

Андерсон дает следующие альтернативные объяснения фотоснимку.

1. Легкая положительная частица движется сверху вниз, теряет часть своей энергии, пронизывая пластинку, и продолжает движение под пластинкой с меньшей энергией.

2. Электрон движется снизу вверх, сталкивается с пластинкой и продолжает свое движение над пластинкой в виде электрона с большей энергией.

3. Две легкие частицы равных знаков одновременно испускаются из одного места пластинки или сходятся в одном ее месте.

Андерсон считает вторую и третью интерпретацию фотоснимка маловероятной; он пишет: «Для объяснения всех этих эффектов (имеются в виду и две аналогичные фотографии — А. А.) представляется необходимым предположить существование положительно заряженных частиц, имеющих массу, сравнимую с массой электрона, или допустить, что треки на одной и той же фотографии расположены так, что они соответствуют согласованному происхождению для двух частиц; последняя возможность представляется весьма маловероятной».

Несколько позже, но совершенно независимо, позитроны были открыты английским физиком П. Блэккетом и его сотрудником Дж. Оккиалини [115]. Обстоятельная работа Блэккета и Оккиали-

ни открыла, наряду с позитронами, «ливни» — потоки осколков атомных ядер, расщепленных быстрыми космическими частицами.

Успеху работы способствовала оригинальная методика, разработанная авторами. Вот как они сами характеризуют ее: «Недавно нами был разработан метод, при помощи которого можно заставить очень быстрые частицы, сопровождающие космическое излучение, фотографировать самих себя или, точнее, следы своих собственных путей в камере Вильсона. При этом фотографии следов удастся получить гораздо легче, чем обыкновенным способом, когда адиабатическое расширение делается наугад».

Авторы описывают схематически свою методику следующим образом: «Камера Вильсона — цилиндрическая (диаметр 13 см, глубина 3 см) установлена так, что ее плоские стенки (крышка и дно) вертикальны. Два счетчика Гейгера — Мюллера (каждый длиной 10 см, диаметром 2 см) расположены один над камерой, другой — под ней. Таким образом, какой-либо трек, проходящий по прямой через оба счетчика, непременно пройдет также и через освещенную часть камеры. . . Счетчики включены в сеточный контур схемы с катодными лампами, регистрирующими исключительно только одновременные разряды — сразу в обоих счетчиках».

Следовательно, если частицы (или группы частиц) одновременно пронизывают оба счетчика, то, в принципе, можно посредством соответствующего реле вызвать расширение в камере Вильсона, осветить ее и сфотографировать треки проходящих сквозь нее частиц. Таким образом было снято свыше 700 фотографий и более чем на 500 из них найдены следы частиц, обладавших очень большой скоростью. Далеко не все быстрые частицы удалось отклонить в сравнительно небольшом магнитном поле в 2—3 тысячи гаусс, поэтому использовано могло быть значительно меньшее число фотографий.

В конце статьи помещены 13 наиболее интересных фотографий, которые подвергаются подробному обсуждению. При этом были открыты группы быстрых частиц («ливни»), исходящие как бы из одной точки пространства, расположенной обычно вне камеры Вильсона. По-видимому, следует считать, что ливни обязаны «взрыву» атомного ядра азота или кислорода воздуха под действием быстрой частицы космического излучения. Подобно Андерсону, авторы использовали в камере Вильсона горизонтальные металлические пластинки (для торможения частиц) и магнитное поле (до 3 тысяч гаусс).

Таким образом, наряду со всеми аргументами, использованными Андерсоном для доказательства существования позитронов, добавился еще один. В самом деле, направление движения частиц в ливне определяется тем, что все они вылетают из одной точки пространства; но тогда, учитывая характер отклонения частиц ливня в магнитном поле, можно по трекам легких частиц сделать заключение о существовании позитронов. В статье содержится еще много соображений и выводов, на которых мы останавливаться не будем. Все это позволило авторам написать в резюме:

«Рассмотрение пробега, ионизации, кривизны и направления движения частиц приводит к подтверждению взгляда, высказанного впервые Андерсоном, о том, что должны существовать частицы с положительным зарядом, но с массой, скорее сравнимой с массой электрона, чем протона».

5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ НЕЙТРОНОВ

В 1932 г. ученик Резерфорда Дж. Чэдвик опубликовал статью под многозначительным названием «Существование нейтрона» [116]*).

Чэдвик отмечает, что В. Боте и Г. Беккер [117] показали, что некоторые легкие элементы под влиянием бомбардировки α -частицами полония испускают сильно проникающее излучение, имеющее, по-видимому, характер γ -излучения. Элементы бериллий и бор дают особенно заметный эффект этого рода.

Дальнейшее исследование этого излучения и особенности его способность выбрасывать протоны из веществ, содержащих водород, привели к ряду противоречий, если считать его γ -излучением.

Далее Чэдвик пишет: «Вследствие этого я поставил дальнейшие опыты с целью исследовать свойства излучения бериллия. Эти опыты показали, что излучение бериллия выбрасывает частицы не только из водорода, но из всех исследованных легких элементов. Экспериментальные результаты оказались очень трудно объяснить с точки зрения гипотезы о квантовой природе излучения бериллия, но эти результаты вытекают, как непосредственное следствие, если предположить, что излучение бериллия состоит из частиц с массой, приблизительно равной массе протона, и без эффективного заряда, т. е. — из нейтронов».

Впервые предположение о существовании таких частиц было высказано Резерфордом в 1920 г. в его беккеровской лекции [118].

Чэдвик анализирует опыты по облучению бериллия, когда атомами отдачи являются протоны и ядра азота. Дополнительно опыты показали, что максимальные скорости ядер отдачи водорода и азота $v_H = 3,3 \cdot 10^9$ см/с и $v_N = 4,7 \cdot 10^8$ см/с. Очевидно, что максимальной скорости ядра отдачи соответствует центральное столкновение с нейтроном. Обозначим для этого случая через M , V и V' массу и скорости нейтрона до и после столкновения и через $m_H = 1$ и $m_N = 14$ массы ядер водорода и азота (мы можем воспользоваться не истинными массами ядер, а относительными атомными массами). Используя законы сохранения импульса и энергии и исключая из них скорость нейтрона после столкновения, получим

$$v_H = [2M/(M+1)]V, \quad v_N = [2M/(M+14)]V.$$

Деля первое уравнение на второе, найдем отношение скоростей водорода и азота: $(M+14)/(M+1) = v_H/v_N = (3,3 \cdot 10^9)/(4,7 \cdot 10^8)$, откуда $M = 1,15$.

*) Предварительное сообщение было помещено в журнале «Nature», 1932, в. 129, р. 312.

Мы видим, что масса нейтрона равна 1 с погрешностью до 15% (т. е. совпадает с массой протона). Это примерно та погрешность, с которой определяются из опыта максимальные скорости ядер отдачи v_H и v_N .

Соображения автора о том, что нейтрон представляет собой тесную комбинацию протона и электрона, надо считать неправильными, так как в этом случае нейтрон обладал бы спином, равным 0 или 1. Из опыта же известно, что нейтрон обладает спином, равным $1/2$ и, следовательно, представляет собой элементарную частицу. В настоящее время известно, что нейтрон в свободном состоянии нестабилен и распадается примерно через 20 минут на протон и электрон.

До открытия нейтрона атомные ядра представляли себе состоящими из протонов и электронов. Ядро с зарядом Z (в единицах e) и массовым числом M состояло из M протонов и $M-Z$ электронов. Например, ядро атома азота с $Z=7$ и $M=14$ содержало 14 протонов и 7 электронов, т. е. 21 ферми-частицу. Из квантовой механики следовало, что ядро азота имело спин, кратный полуцелому, и, следовательно, подчинялось статистике Ферми — Дирака.

Если возможна классификация электронных термов полосатых спектров двухатомной гомеоплярной молекулы, то из чередования интенсивностей линий можно сделать вывод о статистике ядер (см., например, [119]). Розетти по вращательному спектру комбинационного рассеяния с несомненностью установил, что ядро азота подчиняется статистике Бозе — Эйнштейна. Противоречие казалось настолько неразрешимым, что получило название «азотной катастрофы». Между тем если предположить, что атомные ядра состоят из протонов и нейтронов (Д. Д. Иваненко, В. Гейзенберг), то «азотная катастрофа» находит себе естественное разъяснение.

С точки зрения протон-нейтронной модели атомных ядер ядро с зарядом Ze и массовым числом M состоит из Z протонов и $M-Z$ нейтронов; таким образом, ядро азота состоит из 7 протонов и 7 нейтронов, т. е. из 14 ферми-частиц, но тогда оно подчиняется статистике Бозе — Эйнштейна, в согласии со спектроскопическими наблюдениями.

6. ДАЛЬНЕЙШИЕ ПУТИ РАЗВИТИЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ*)

Несколько событий в первой половине 30-х годов могут считаться началом нового этапа развития физики — этапа, на котором доминирующую роль начинает играть ядерная физика, а затем — физика элементарных частиц. К началу 30-х годов полностью завершено создание нерелятивистской квантовой механики и в основных чертах сформулирована релятивистская кванто-

*) Более подробное рассмотрение этих вопросов можно найти в книге: Окунь Л. Б. Физика элементарных частиц. — М.: Наука, 1984.

вая теория. Из релятивистского волнового уравнения Дирака (для электрона) было предсказано существование античастицы электрона — позитрона, частицы, имеющей точно такую же массу, что и электрон, но другой знак электрического заряда, способную при столкновении с электроном аннигилировать: $e^+ + e^- \rightarrow \gamma$. Вскоре позитрон был открыт в космическом излучении.

С принципиальной точки зрения открытие уравнения Дирака показало, что в области релятивистской квантовой физики невозможно построение последовательной теории одной частицы во внешнем поле. Уравнение Дирака с необходимостью описывает два сорта частиц — электроны и позитроны, причем полная теория обязательно должна принимать во внимание возможность аннигиляции и парного рождения этих частиц. Так было положено начало созданию квантовой теории поля — теории с переменным числом частиц, учитывающей возможность их рождения и уничтожения. Эта теория в применении к поглощению и излучению фотонов атомами (фактически, квантовая электродинамика) также в общих чертах была завершена в начале 30-х годов.

Открытие протон-нейтронной структуры атомных ядер поставило совершенно новый вопрос — вопрос о силах, удерживающих протоны и нейтроны внутри ядра. С самого начала было ясно, что эти силы не могут быть электромагнитными, так как электростатическое взаимодействие протонов соответствует отталкиванию, а электрически нейтральные нейтроны почти не участвуют в электромагнитном взаимодействии. Таким образом, возникает представление о совершенно новом виде фундаментальных сил, действующих между элементарными частицами — нейтронами и протонами («нуклонами»). Взаимодействие, с которым связаны эти силы, получило название «сильное взаимодействие».

Характерным свойством сильного взаимодействия является короткодействие: если нейтроны и протоны разделены расстоянием, большим размера атомного ядра (т. е. порядка 10^{-13} см), сильное взаимодействие между ними исчезает. Японский физик Х. Юкава в 1935 г. предположил, что такое свойство сильного взаимодействия связано с тем, что оно обусловлено обменом между нуклонами — частицами с массой порядка $200 m_e$ (m_e — масса электрона), названными Юкавой «мезонами». В силу квантово-механического соотношения неопределенностей для энергии и времени нуклон может излучать частицу с массой m без сохранения энергии на короткое время: $t \lesssim \hbar / mc^2$ (\hbar — постоянная Планка, c — скорость света). За это время испущенная частица может пройти путь, не больший чем $l = tc = \hbar / mc$, и на этом расстоянии от исходного нуклона испущенная частица может быть поглощена другим нуклоном. Таким образом, обмен между нейтронами и протонами частицами с массой m приводит к силам взаимодействия между нуклонами, очень быстро (экспоненциально) убывающим на расстояниях, больших \hbar / mc . При $m \approx 200 m_e$ $\hbar / mc \approx 10^{-13}$ см.

Спустя некоторое время после предсказания Юкавы, в космическом излучении была обнаружена частица с массой $206 m_e$ и

казалось, что теоретический прогноз Юкавы получил блестящее подтверждение. Вскоре, однако, выяснилось, что это не так: открытая частица, подобно электрону, была неспособна к сильным взаимодействиям, вследствие чего ее обменом никак невозможно объяснить сильное взаимодействие нуклонов! Позднее, однако, было установлено, что эта частица (ее называли « μ -мезон») является продуктом распада другой, несколько более тяжелой частицы — π -мезона. Эта частица в отличие от μ -мезона, участвует в сильных взаимодействиях и действительно является предсказанным Юкавой мезоном.

Сильное взаимодействие представляет собой совершенно новый вид взаимодействия, принципиально не сводящийся к электромагнитным или гравитационным взаимодействиям. До открытия сильного взаимодействия все известные в природе силы можно было объяснить как косвенное проявление электромагнитного взаимодействия между частицами (плюс, конечно, независимое гравитационное взаимодействие, играющее несколько особую роль). Таковы, например, силы трения, вязкости, упругости и т. д. Открытие сильного взаимодействияполнило семейство «фундаментальных взаимодействий» в природе. Почти одновременно с сильным взаимодействием было открыто и другое фундаментальное взаимодействие — «слабое взаимодействие».

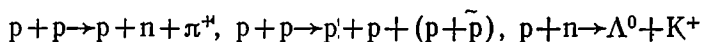
Ранее известное проявление слабого взаимодействия — это β -распад нейтрона. (Первоначально наблюдались β -распады ядер, когда β -распаду подвергается один из нейтронов, входящих в состав ядра.) При β -распаде нейтрона последний превращается в протон с испусканием электрона. Изучение энергетического спектра электронов при β -распаде ядер показало, что они не имеют определенной энергии, а распределены в некотором энергетическом интервале. Это побудило В. Паули предположить, что при β -распаде нейтрона, помимо протона и электрона, рождается еще одна нейтральная частица — «нейтрино»: $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}_e$ (для нейтрино здесь принято современное обозначение: $\bar{\nu}_e$ — «электронное антинейтрино»). Гипотеза о том, что при β -распаде испускается нейтрино, решает проблему не только сохранения энергии, но и сохранения момента импульса, если предположить, что нейтрино несет полуцелый спин ($s = 1/2$).

Количественная теория β -распада была предложена Э. Ферми в 1935 г. Согласно этой теории, процесс β -распада обусловлен новым фундаментальным взаимодействием — слабым взаимодействием. В дальнейшем было открыто множество других процессов, связанных со слабым взаимодействием элементарных частиц, например распад упомянутого выше μ -мезона на электрон и два нейтрино или распад π -мезона на μ -мезон и нейтрино. Чаще всего слабое взаимодействие приводит к процессам превращения частиц друг в друга, однако оно же может приводить к простому отталкиванию или притяжению между частицами, проявляющемуся в процессе упругого рассеяния. Таково, например, рассеяние нейтрино на электроне.

Испускаемое при β -распаде нейтрино не участвует ни в сильных, ни в электромагнитных взаимодействиях, поэтому нейтрино очень слабо взаимодействует с веществом. О слабости слабого взаимодействия можно судить по тому, что в обычных условиях длина свободного пробега нейтрино, скажем в железе, равна, грубо говоря, расстоянию до ближайших звезд.

Таким образом, к середине 30-х годов было уже известно, что в природе существуют по меньшей мере четыре вида фундаментальных взаимодействий: электромагнитное, гравитационное, сильное и слабое.

В послевоенные годы было установлено, что сильные взаимодействия отнюдь не исчерпываются взаимодействием нуклонов посредством обмена π -мезонами. Сильные взаимодействия — это широкий класс процессов, в которых частицы могут превращаться друг в друга или могут рождаться новые частицы. Например, при столкновении нуклонов могут рождаться π -мезоны, нуклон-antinуклонные пары или « K -мезоны» и «гипероны»:



(Λ^0 — « Λ -гиперон», K^+ — положительно заряженный K -мезон). Все эти частицы, «участвующие» в сильном взаимодействии, получили название «адроны». Среди них некоторые частицы распадаются на более легкие, «обычные» частицы (нуклоны и π -мезоны) за счет слабого взаимодействия, это так называемые «странные частицы» — гипероны и K -мезоны. Типичное время жизни странных частиц 10^{-8} — 10^{-10} с — огромное время по сравнению с характерным «ядерным временем» 10^{-23} с!

С другой стороны, в 50-е и особенно в 60-е годы были открыты короткоживущие частицы, время жизни которых лишь ненамного превосходит ядерное время (10^{-23} с). Это так называемые резонансы. Общее число элементарных частиц — адронов — превысило к концу 60-х годов несколько сотен, так что число «элементарных» частиц стало большим, чем число элементов в периодической таблице Менделеева.

Разумеется, обилие элементарных частиц с самого начала поставило на повестку дня вопрос, не являются ли они в действительности составными. Весь предшествующий опыт физики, казалось, предсказывал такую возможность: ведь выяснилось в свое время, что молекулы состоят из атомов, атомы — из ядер и электронов, ядра — из нуклонов... И все же в течение нескольких десятилетий идея составных элементарных частиц решительно отвергалась теорией. Причина этого заключалась в том, что с квантово-механической точки зрения идея о составных элементарных частицах подразумевает равенство волновой функции составной частицы (хотя бы приближенное) произведению волновых функций составляющих частиц и равенство полной энергии этой составной частицы (что в релятивистской теории совпадает в соответствующих единицах с ее массой) — сумме энергий (т. е. масс) составляющих частиц. Иными словами, энергия связи (аналог

ядерного дефекта массы) не должна быть слишком велика. Квантовая механика дает количественный критерий выполнения этого условия: энергия связи должна быть существенно меньше энергии возбуждения составной системы, т. е. расстояния между ее энергетическими уровнями. Если этот критерий нарушен, понятие о составной системе теряет смысл: так, например, молекула не может считаться состоящей из двух атомов, если энергия связи этих атомов сравнима или больше энергии их диссоциации. Когда речь идет об атомном ядре, мы можем утверждать, что оно состоит из нуклонов лишь в той мере, в которой дефект массы на один нуклон меньше собственной энергии нуклона, т. е. его массы. Погрешность, с которой выполнено это условие, порядка 1%.

Таким образом, казалось бы, что любая элементарная частица, например нуклон, могла бы состоять из каких-то других частиц только в том случае, если энергия связи этих частиц меньше их собственной массы или массы нуклона, т. е. 1 ГэВ (1 ГэВ = 10^9 эВ). Между тем, хотя энергии, достигнутые на больших ускорителях, существенно больше этой величины, нуклон никогда не удавалось разбить на «составные части». Это и заставило в течение долгого времени считать элементарные частицы «истинно» элементарными.

Величайшим достижением физики элементарных частиц за последние 20 лет явилось открытие нового «уровня элементарности», на котором все сильнодействующие частицы (адроны) оказались — несмотря на сказанное выше! — состоящими из «кварков» и «глюонов». Однако подобно тому, как это часто уже бывало в физике, это открытие сопровождалось радикальным пересмотром понятия составной системы. Оказалось, что нуклон «состоит» из кварков и глюонов лишь в том смысле, что, «прощупывая» его на очень малых расстояниях, например с помощью рассеяния на нем очень энергичных электронов, можно почувствовать его кварк-глюонную структуру. Невозможно, однако, выделить кварки или глюоны в свободном виде, т. е. реально разделить нуклон на «составляющие» частицы. Конечно, в этой ситуации само понятие «состоит из» становится несколько условным, и все же составной характер адронов на малых расстояниях представляется в настоящее время несомненным. Невозможность наблюдать кварки и глюоны в свободном виде получила название «пленения» или «конфайнмента» (от английского «confinement»). На сегодняшний день не существует количественной теории конфайнмента, однако, принципиально, теория, отвечающая за это явление, так называемая квантовая хромодинамика, сформулирована. Некоторые характерные черты этой теории, и в первую очередь рост силы взаимодействия на больших расстояниях (так называемая «асимптотическая свобода») делает явление конфайнмента весьма правдоподобным.

Квантовая хромодинамика — это современная теория сильных взаимодействий, она описывает взаимодействие кварков с помощью обмена глюонами, в сравнительно близкой аналогии с

тем, как, например, электроны взаимодействуют с помощью обмена фотонами. Взаимодействие физических адронов представляет собой взаимодействие составных систем, нечто вроде взаимодействия атомов или молекул; это взаимодействие является вторичным по отношению к фундаментальному взаимодействию кварков и глюонов (вроде сил Ван дер Ваальса между атомами). И все же, на сравнительно больших расстояниях (порядка 10^{-13} см) во взаимодействии между нуклонами доминирует обмен π -мезоном, в точном соответствии с предсказанием Юкавы!

Какие же кварки и глюоны известны в настоящее время? Самые «старые» адроны — нуклоны и π -мезоны — состоят в основном из кварков двух типов: u -кварков и d -кварков (и их античастиц): u -кварки имеют заряд, равный $2/3$ элементарного заряда, d -кварки — $(-1/3)$. Протон состоит из двух u -кварков и одного d -кварка: $p \sim uud$, нейтрон — из двух d - и одного u -кварка: $n \sim ddu$. Легко видеть, что электрический заряд протона равен, как и должно быть, $+1$, а нейтрона — нулю. π -мезоны состоят из кварка и антикварка: $\pi^+ \sim u\bar{d}$, $\pi^- \sim \bar{u}d$, нейтральный π^0 -мезон состоит из $u\bar{u}$ и $d\bar{d}$. Кроме того, нуклоны и π -мезоны содержат значительную примесь глюонов; последние, однако, не несут электрического заряда, как и некоторых других квантовых чисел, по которым и отличаются разные адроны. Поэтому «индивидуальность» адрона определяется тем, из каких кварков он состоит.

Кроме u - и d -кварков в настоящее время известны еще по крайней мере 3, а может быть, и 4 вида кварков (сообщение об открытии последнего, шестого по общему счету « t -кварка» на ускорителе протон-антипротонных пучков в Европейском Центре ядерных исследований в Женеве было сделано только что К. Руббио. Пока, однако, не существует печатного материала об этом открытии.) Самый легкий после u - и d -кварков — это « s -кварк», так называемый «странный» кварк. s -кварк, подобно d -кварку, имеет электрический заряд $-1/3$, он входит в состав упоминавшихся выше «странных» частиц — гиперонов и Λ -мезонов. В 1974 г. был открыт « c -кварк» — «очарованный» кварк, и почти сразу вслед за ним « b -кварк» — «прелестный» кварк. Их заряды равны соответственно $+2/3$ и $-1/3$; t -кварк должен иметь заряд $+2/3$. Таким образом, мы имеем всего 6 кварков:

$$\begin{array}{c} u, c, t, \\ d, s, b; \end{array}$$

верхние кварки в этих столбцах имеют заряд $+2/3$, нижние $-1/3$.

Адроны, содержащие более тяжелые кварки — странные, очарованные . . . и т. д., распадаются на более легкие адроны именно потому, что более тяжелые кварки распадаются на более легкие (это напоминает β -распад ядер, когда один из нейтронов ядра распадается на более легкий нуклон — протон и электрон). За распада кварков ответственны слабые взаимодействия.

Говоря о слабых взаимодействиях, необходимо упомянуть о том, какие в настоящее время известны «лептоны», т. е. частицы, не участвующие в сильных взаимодействиях. Этих частиц, как и кварков, всего шесть (плюс, конечно, античастицы):

$$\begin{array}{ccc} \nu_e, & \nu_\mu, & \nu_\tau \\ e^-, & \mu^-, & \tau^-. \end{array}$$

Кроме обычного электрона, сюда, как видно, входят: ν_e — электронное нейтрино, испускаемое при β -распаде (и K -захвате); μ -мезон, о котором речь уже шла выше, и связанное с ним нейтрино ν_μ , которое, как было доказано прямыми опытами, отличается от ν_e ; а также сравнительно недавно открытый тяжелый τ -лептон (его масса в два раза больше массы протона) и связанное с ним нейтрино ν_τ . Масса покоя всех нейтрино либо равна нулю, либо невелика. (В последнее время имеются экспериментальные и теоретические указания, что она отлична от нуля.) Бросается в глаза аналогия между кварками и лептонами: и здесь и там мы имеем 6 сортов частиц, как бы 3 «поколения» кварков и 3 «поколения» лептонов, причем каждое следующее поколение имеет свойства (например, электрический заряд), очень похожие на свойства предыдущих поколений.

Кварки и лептоны — это сегодняшний «уровень элементарности». Возникает естественный вопрос: не могут ли кварки и лептоны сами состоять из более элементарных объектов («преонов»)? Хотя существует много работ, в которых обсуждается эта идея, реально пока нет указаний на составной характер кварков и лептонов (конечно, возможно, что эти указания появятся завтра!). Более того, идея о составных кварках и лептонах наталкивается на серьезные трудности: оказывается, нелегко совместить наблюдаемые небольшие массы кварков и лептонов с отсутствием (или почти полным отсутствием) у них «размера» (в частности, электромагнитного формфактора).

Как уже упоминалось, в сильных взаимодействиях кроме кварков участвуют еще глюоны, они также, вместе с фотоном, принадлежат к сегодняшнему коллективу элементарных частиц. Фотон является переносчиком электромагнитного взаимодействия, глюоны — сильного; как фотон, так и глюоны имеют спин, равный единице (спин кварков и лептонов равен $1/2$). Слабые взаимодействия также связаны с некоторыми векторными бозонами (т. е. с частицами со спином 1). Это — W^+ , W^- и Z^0 -бозоны. Эти три бозона имеют весьма большую массу (порядка 80—90 масс протона), они недавно открыты на ускорителе встречных пучков в Жене, который был специально построен для их поиска. Наконец, теория предсказывает необходимость существования бесспиновых частиц — так называемых «хиггсовских бозонов», слабо взаимодействующих с веществом. Хиггсовские бозоны не открыты в настоящее время экспериментально, несомненно, что их поиск будет одной из важнейших экспериментальных задач в ближайшие годы.

Остановимся теперь коротко на описании современного состояния теории элементарных частиц. Основной идеей, лежащей в основе этой теории, является идея локальной калибровочной инвариантности. В простейшем случае мы сталкиваемся с локальной калибровочной инвариантностью в квантовой электродинамике. Теория, описываемая уравнением Шредингера или уравнением Дирака, допускает так называемые «глобальные» фазовые преобразования волновой функции, т. е. замену $\psi \rightarrow \exp(i\alpha)\psi$, где параметр α не зависит от координат и времени. При переходе к локальным преобразованиям, т. е. к случаю, когда α есть функция координат и времени: $\alpha = \alpha(x_\mu)$, инвариантность теории нарушается из-за наличия в уравнении Шредингера (или Дирака) производных по x_μ . Однако включение электромагнитного взаимодействия частиц, описываемых полем $\psi(x)$, восстанавливает утерянную инвариантность, так как появляющиеся при локальном фазовом преобразовании члены могут быть скомпенсированы соответствующим калибровочным преобразованием электромагнитного потенциала. Таким образом, электромагнитное поле выступает в роли «компенсирующего» поля, его существование расширяет глобальную инвариантность теории до локальной. Принцип локальной фазовой инвариантности объясняет существование электромагнитного взаимодействия.

Аналогичная ситуация известна со времени Эйнштейна и в гравитации. Специальный принцип относительности требует инвариантности теории к «глобальным» преобразованиям Лорентца, когда параметры преобразования не зависят от координат и времени. Что касается «локальных» преобразований Лорентца, когда параметры преобразования (скажем, скорость) зависят, например, от времени (ускоренное движение) или, в более общем случае, когда имеют место произвольные преобразования координат и времени, то теория, вообще говоря, не инвариантна к таким преобразованиям. Она, однако, становится инвариантной к ним, если включить гравитационное поле и произвести соответствующее его преобразование при переходе к ускоренной системе координат. В этом и состоит идея общей ковариантности Эйнштейна.

Теория сильного взаимодействия — квантовая хромодинамика — также основана на некоторой локальной калибровочной симметрии. Эта симметрия связана с тем, что каждый из кварков (например, u -кварк) может находиться в одном из трех равноправных состояний — иметь один из трех «цветов» (разумеется, эти цвета не имеют ничего общего с настоящим цветом). Локальная инвариантность теории по отношению к преобразованиям цветов кварков требует существования компенсирующих полей — глюонов и соответствующего калибровочного взаимодействия кварков и глюонов.

Наконец, современная теория слабых взаимодействий тоже основана на локальной калибровочной инвариантности по отношению к преобразованиям группы так называемого «слабого изотопического спина». Существенное отличие от электродинамики

или хромодинамики состоит, однако, в том, что здесь мы имеем дело с так называемым «спонтанным нарушением симметрии». Поскольку представление о спонтанном нарушении симметрии является принципиально новым теоретическим понятием, остановимся коротко на нем.

Идея спонтанного нарушения симметрии заимствована физикой элементарных частиц у физики твердого тела. Самый известный пример представляет здесь намагниченный ферромагнетик. Взаимодействия отдельных атомов ферромагнетика могут быть сферически симметричны, однако благодаря образованию общего вектора намагниченности изотропия свойств ферромагнетика утрачивается, появляется выделенное направление, или спонтанное нарушение вращательной симметрии. Характерно в этом примере то, что возникающая анизотропия является не следствием исходно заложеной анизотропии взаимодействия, а результатом несимметрии основного состояния ферромагнетика, в котором энергетически выгодной оказывается параллельная ориентация спинов всех атомов. Аналогичным образом теория слабого взаимодействия основана на исходно симметричном взаимодействии, которое проявляет себя несимметричным образом благодаря тому, что физический вакуум не симметричен к вращению в «пространстве слабого изотопического спина». В теории с ненарушенной симметрией калибровочные бозоны W^+ , W^- и Z^0 имели бы, подобно фотону, массу, равную нулю, в теории со спонтанно нарушенной симметрией они становятся массивными.

До сих пор мы ссылались на теорию слабого взаимодействия. На самом деле речь идет о единой теории слабого и электромагнитного взаимодействий. Мечта об объединении различных фундаментальных взаимодействий в рамках единого взаимодействия владела умами теоретиков едва ли не с 20-х годов. Современная единая теория «электрослабого» взаимодействия оказалась первой успешной попыткой в этом направлении. В этой теории слабое и электромагнитное взаимодействия выступают как различные проявления единого электрослабого взаимодействия, подобно тому, как в обычной электродинамике электростатические и магнитные силы являются двумя сторонами одного и того же электромагнитного взаимодействия. Решающую роль сыграла здесь идея спонтанного нарушения симметрии, которая позволила объяснить, почему переносчик электромагнитного взаимодействия — фотон — имеет массу покоя равную нулю, а переносчики слабого взаимодействия W^+ , W^- и Z^0 массивны.

Единая теория электрослабого взаимодействия вместе с квантовой хромодинамикой образуют прочную основу современной физики элементарных частиц. Главные черты этой теории в будущем едва ли претерпят существенные изменения. Квантовую хромодинамику вместе с единой теорией электрослабого взаимодействия называют сейчас «стандартной моделью». Вместе с тем «стандартная модель» оставляет нерешенной массу принципиальных вопросов. Попыткой решения этих вопросов занята современ-

ная теория, причем в некоторых аспектах достигнуты существенные успехи, тогда как в других направлениях продвижение практически отсутствует.

Довольно успешными оказываются попытки объединения сильного и электрослабых взаимодействий (так называемые теории «великого объединения»). Здесь, например, удастся объяснить, почему все элементарные частицы имеют универсальный электрический заряд, и одновременно объяснить дробный характер заряда кварков. В рамках теорий великого объединения можно до некоторой степени понять несохранение четности в слабых взаимодействиях при ее сохранении в сильном и электромагнитном взаимодействиях, объяснить, почему при современных энергиях сильные взаимодействия существенно сильнее, скажем, электромагнитных. Теории великого объединения позволяют наметить весьма правдоподобный путь к вычислению основного параметра единой электрослабой теории — так называемого «угла Вайнберга». Наконец, эти теории предсказывают интереснейшее явление — нестабильность протона с огромным временем жизни, порядка, скажем, 10^{30} лет.

Вместе с тем теории великого объединения наталкиваются на большие теоретические трудности и, в простейших вариантах, предсказывают все же слишком малое время жизни протона, уже сегодня противоречащее полученному из эксперимента.

Другим очень интересным направлением развития теории элементарных частиц являются так называемые «суперсимметричные теории», в которых постулируется особая симметрия между фермионами и бозонами. Этот класс теорий, возможно, позволит решить старую проблему квантовой теории поля — проблему расходимостей. В конце 40-х годов эта проблема была решена частично: был предложен рецепт для получения соотношений между низкоэнергетическими величинами путем исключения из уравнений неизвестного высокоэнергетического вклада («метод перенормировок»). Метод перенормировок привел к замечательным успехам, он позволил, в частности, объяснить причину лэмбовского сдвига в атоме водорода и вычислить с огромной точностью поправку к магнитным моментам электрона и μ -мезона. Вместе с тем метод перенормировок в какой-то мере лишь «замечает мусор под ковер», избегая ответа на вопрос об истинном характере теории при высоких энергиях. В настоящее время неясно, позволит ли действительно суперсимметрия существенно продвинуться в понимании этого вопроса.

Пожалуй, наиболее «амбициозная» теория, претендующая на роль «окончательной», «всеобщей» теории, — это теория супергравитации, которую можно понимать либо как теорию локальной калибровочной суперсимметрии, либо как теорию гравитации в суперпространстве. К сожалению, следствия этой замечательно красивой теории, как, впрочем, и других разновидностей суперсимметричных теорий, не обнаруживают ни малейшего сходства с окружающим нас миром. Будущее покажет, окажется ли внутрен-

няя красота этих теорий достаточной для того, чтобы доказать, что сегодняшняя ситуация является лишь временным упрямством Природы, скрывающей свою истинную сущность.

Тем временем в плане объяснения существующих экспериментальных фактов остаются нерешенными самые кардинальные вопросы. Вероятно, наиболее значительный из них — это проблема существования поколений кварков и лептонов. Еще в конце 30-х годов физики были поражены существованием μ -мезона, частицы, со свойствами, совершенно аналогичными электрону, но имеющей гораздо большую массу. С тех пор «загадка μ -мезона» превратилась в «загадку трех (по меньшей мере!) поколений», но мы ни на йоту не ближе к решению этой загадки, чем почти 50 лет тому назад. Решение проблемы поколений кажется особенно важным в связи с тем, что, фактически, это — проблема спектра масс кварков и лептонов, а также так называемых «углов смешивания» — важнейших параметров слабого взаимодействия. До тех пор пока массы кварков и лептонов и углы смешивания остаются определенными из эксперимента параметрами, единая теория электро-слабого взаимодействия может в лучшем случае претендовать на роль хорошей, но феноменологической модели.

Таковым представляется положение дел в современной физике элементарных частиц — переднем крае физики сегодняшнего дня. Останется ли физика частиц передним краем физики завтра, или эта почетная роль перейдет, например, к астрофизике? Будущее покажет.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Whittaker E.* A History of the Theories of Aether and Electricity. V. I, II.— N. Y.: Harper and brothers, 1960.
2. *Ансельм А. И.* Основы статистической физики и термодинамики.— М.: Наука, 1973.
3. *Перрен Ж.* Атомы.— М.: ГНТИ, 1924.
4. *Тамм И. Е.* Основы теории электричества.— М.: Наука, 1976.
5. *Борн М.* Атомная физика.— М.: Мир, 1965.
6. *Rubens H., Kurlbaum F.*— Berlin Zitz., 1900, Bd 25, S. 929.
7. *Planck M.*— Verhandl. deutsch. phys. Geselsch., 1900, Bd 2, S. 202.
8. *Планк М.* Избранные труды.— М.: Наука, 1975.
9. *Планк М.* Единство физической картины мира.— М.: Наука, 1966, с. 16.
10. *Lummer O., Pringsheim E.*— Verhandl. deutsch. phys. Geselsch., 1900, Bd 2, S. 163.
11. *Paschen F.*— Ann. Phys., 1901, Bd 4, S. 277.
12. *Planck M.*— Verhandl. deutsch. phys. Geselsch., 1900, Bd. 2, S. 237.
13. *Зоммерфельд А.* Термодинамика и статистическая физика.— М.: ИЛ, 1955.
14. *Einstein A.*— Ann. Phys., 1905, Bd 17, S. 132.
15. *Эйнштейн А.* Собрание научных трудов— М.: Наука, 1965, т. I; 1966, т. II, III; 1967, т. IV.
16. *Lenard P.*— Ann. Phys., 1902, Bd 8, S. 169.
17. *Max Plank zum Gedenken.*— Berlin: Akademie-Verlag, 1959, S. 64.
18. *Einstein A.*— Abhandl. deutsch. Bunsengeselsch., 1914, Bd 3, S. 330.
19. *Лоренц Г. А.* Статистические теории в термодинамике.— Л.; М.: ОНТИ, 1935.
20. *Compton A. H.*— Phys. Rev., 1923, v. 21, p. 483.
21. *Debye P.*— Z. Phys., 1923, Bd 24, S. 161.
22. *Hund F.* Geschichte der Quantentheorie.— Mannheim: Hochschultaschenbücher-Verlag, 1967; рус. пер.: *Хунд Ф.* История квантовой теории.— Киев: Наукова думка, 1980.
23. *Einstein A.*— Ann. Phys., 1907, Bd 22, S. 180.
24. *Беккер Р.* Теория электричества. Т. II. Электронная теория.— М.; Л.: Гостехиздат, 1941.
25. *Паули В.* Теория относительности.— М.: Наука, 1983.
26. *Гинзбург В. Л.* О теории относительности.— М.: Наука, 1979.
27. *Einstein A.*— Ann. Phys., 1905, Bd 17, S. 891.
28. *Planck M.*— Verhandl. deutsch. phys. Geselsch., 1906, Bd 8, S. 136.
29. *Lewis G. N., Tolman R. C.*— Phil. Mag., 1909, v. 18, p. 517.
30. *Einstein A.*— Ann. Phys., 1905, Bd 18, S. 639.
31. *Minkowski H.*— Ann. Phys., 1915, Bd 47, S. 927.
32. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов.— М.: Наука, 1967.
33. *Einstein A.*— Ann. Phys., 1905, Bd 17, S. 549.
34. *Зоммерфельд А.* Механика деформируемых сред.— М.: ИЛ, 1954.
35. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. II— М.: Наука, 1974.
36. *Rutherford E.*— Phil. Mag., 1911, v. 21, p. 669.
37. *Резерфорд Э.* Избранные труды.— М.: Наука, 1972.
38. *Geiger H., Marsden E.*— Phil. Mag., 1913, v. 25, p. 604.
39. *Rutherford E.*— Phil. Mag., 1913, v. 27, p. 488.
40. *Conn G. K. T., Turner H. D.* The evolution of the nuclear atom.— L.: Jiffie Books LTD, 1965.

41. *Mosley H. G.* — *Phil. Mag.*, 1913, v. 26, p. 1024; 1914, v. 27, p. 703.
42. *Bohr N.* — *Phil. Mag.*, 1913, v. 26, p. 1 (часть I), p. 476 (часть II), p. 857 (часть III).
43. *Бор Н.* Избранные научные труды. Т. I. — М.: Наука, 1970.
44. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика. — М.: Наука, 1973.
45. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. — М.: Наука, 1973.
46. *Bohr N.* — *Nature*, 1913, v. 92, p. 231, 232.
47. *Franck J., Hertz G.* — *Verhandl. deutsch. phys. Geselsch.*, 1914, Bd 116, p. 457, 517.
48. *Sommerfeld A.* *Atombau und Spektrallinien.* — Braunschweig: Friedr. Vieweg und Sohn, 1924.
49. *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. Т. I — М.: Гостехиздат, 1956.
50. *Stern O.* — *Z. Phys.*, 1921, Bd 7, S. 249.
51. *Gerlach W., Stern O.* — *Z. Phys.*, 1921, Bd 8, S. 10; 1922, Bd 9, S. 349, 352.
52. Теоретическая физика 20-го века /Под ред. М. Фирца и В. Вайскопфа. — М.: ИЛ, 1962.
53. *Uhlenbeck G. E., Gaudsmit S.* — *Naturwissensch.*, 1925, Bd 18, S. 953.
54. *Уиттекер Е.* Аналитическая динамика. — М.; Л.: ОНТИ, 1937.
55. *De Broglie L.* — *Compt. Rend.*, 1923, v. 177, p. 507—548.
56. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
57. *De Broglie L.* — *Compt. Rend.*, 1924, v. 179, p. 39.
58. *Davison C. J., Germer L. H.* — *Phys. Rev.*, 1927, v. 30, p. 705.
59. *Тригг Дж.* Решающие эксперименты в современной физике. — М.: Мир, 1974.
60. *Bose S. N.* — *Z. Phys.*, 1924, Bd 26, S. 181.
61. *Einstein A.* *Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss. Phys.-math. Kl.*, 1924, S. 261; 1925, S. 3.
62. *Fermi E.* — *Z. Phys.*, 1926, Bd 36, S. 902.
63. *Pauli W.* — *Z. Phys.*, 1926, Bd 41, S. 81.
64. *Sommerfeld A.* — *Z. Phys.*, 1928, Bd 47, S. 1.
65. *Бете Г., Зоммерфельд А.* Электронная теория металлов. — М.; Л.: ГОНТИ, 1938.
66. *Bloch F.* — *Z. Phys.*, 1928, Bd 52, S. 555.
67. *Ladenburg R.* — *Z. Phys.*, 1921, Bd 4, S. 451.
68. *Kramers H. A.* — *Nature*, 1924, v. 113, p. 673; v. 114, p. 310.
69. *Heisenberg W.* — *Z. Phys.*, 1925, Bd 33, S. 879.
70. *Born M., Jordan P.* — *Z. Phys.*, 1925, Bd 34, S. 858.
71. *Born M., Heisenberg W., Jordan P.* — *Z. Phys.*, 1926, Bd 35, S. 557.
72. *Мэтьюз Дж., Уокер Р.* Математические методы физики. — М.: Атомиздат, 1972.
73. *Dirac P. A. M.* — *Proc. Roy. Soc. A*, 1925, v. 109, p. 642.
74. *Dirac P. A. M.* — *Proc. Roy. Soc. A*, 1926, v. 110, p. 561.
75. *Pauli W.* — *Z. Phys.*, 1926, Bd 36, S. 336.
76. *Schrödinger E.* *Abhandlungen zur Wellenmechanik.* 2 Auflage — Leipzig: Verlag von J. A. Barth, 1928.
77. *Кочин Н. Е.* Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. — М.: Изд-во АН СССР, 1951.
78. *Капица П. Л.* Эксперимент. Теория. Практика. — М.: Наука, 1981.
79. *Ландсберг Г. С.* Оптика. — М.: Наука, 1976.
80. *Шифф Л.* Квантовая механика. — М.: ИЛ, 1959.
81. *Курачт Р., Гильберт Д.* Методы математической физики. Т. I. — М.: Наука, 1974.
82. *Ландсберг Г. С., Мандельштам Л. И.* — Журнал русского физико-химического общества. Часть физическая, 1928, т. 60, с. 335.
83. *Raman C. V., Krishnan K. S.* — *Nature*, 1928, 31 March, 21 April, 5 May.
84. *Smekal A.* — *Naturwissensch.*, 1923, Bd 11, S. 873.
85. *Born M.* — *Z. Phys.*, 1926, Bd 38, S. 803.
86. *Биберман Л., Сушкин Н., Фабрикант В.* — ДАН СССР, 1949, т. 66, с. 185.
87. *Фон Нейман И.* Математические основы квантовой механики. — М.: Наука, 1964.
88. *Heisenberg W.* — *Z. Phys.*, 1927, Bd 43, S. 172.
89. *Мандельштам Л. И., Тамм И. Е.* — Изв. АН СССР: Физ., 1945, т. 9, с. 122; *Фок В. А.* — ЖЭТФ, 1947, т. 17, с. 93.

90. *Albert Einstein*, Philosopher-Scientist. Library of Living Philosophers.— Evanston Illinois, 1949, v. 7, p. 199.
91. *Бор Н.* Атомная физика и человеческое познание.— М.: ИЛ, 1961, с. 51.
92. *Bohr N.* — Nature, 1928, v. 121, p. 78, 580.
93. *Толмен Р.* Относительность. Термодинамика. Космология.— М.: Наука, 1974, с. 199.
94. *Heisenberg W.* — Z. Phys., 1926, Bd 39, S. 499.
95. *Heisenberg W.* — Z. Phys., 1926, Bd 38, S. 411.
96. *Dirac P. A. M.* — Proc. Roy. Soc. A., 1926, v. 112, p. 661.
97. *Araki G.* — Proc. Phys. Math. Soc. of Japan, 1937, v. 19, p. 128.
98. *Heitler W., London F.* — Z. Phys., 1927, Bd 44, S. 455.
99. *Gamow G.* — Z. Phys., 1928, Bd 51, S. 204.
100. *Gurney R. W., Condon E. U.* — Nature, 1928, v. 122, p. 439.
101. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика.— М.: Наука, 1974.
102. *Gamow G., Critchfield C. L.* Theory of Atomic Nucleus and Nuclear Energy-Sources.— Oxford: Clarendon Press, 1949.
103. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников.— М.: Наука, 1978.
104. *Bloch F.* — Z. Phys., 1929, Bd 57, S. 545.
105. *Dirac P. A. M.* — Proc. Roy. Soc. A, 1927, v. 114, p. 243, 710.
106. *Jordan P., Payli W.* — Z. Phys., 1928, Bd 47, S. 151.
107. *Heisenberg W., Payli W.* — Z. Phys., 1929, Bd 56, S. 1; 1930, Bd 59, S. 169.
108. *Fermi E.* — Rev. Mod. Phys., 1932, v. 4, № 1, p. 87.
109. *Pauli W.* — Z. Phys., 1927, Bd 43, S. 601.
110. *Паули В.* Общие принципы волновой механики.— М.; Л.: Гостехиздат, 1947.
111. *Dirac P. A. M.* — Proc. Roy. Soc. A, 1928, v. 117, p. 610.
112. *Dirac P. A. M.* — Proc. Roy. Soc. A, 1928, v. 118, p. 351.
113. *Dirac P. A. M.* — Proc. Roy. Soc. A, 1931, v. 126, p. 360; v. 133, p. 60.
114. *Anderson K. D.* Science, 1932, v. 76, p. 238.
115. *Blackett P. M. S., Occhialini G. P. S.* — Proc. Roy. Soc. A, 1933, v. 139, p. 699; рус. пер.: УФН, 1933, т. 13, с. 491.
116. *Chadwick J.* — Proc. Roy. Soc. A., 1932, v. 136, p. 692. рус. пер.: УФН, 1932, т. 12, с. 557.
117. *Bothe W., Becker R.* — Z. Phys., 1930, Bd 66, S. 289.
118. *Rutherford E.* — Proc. Roy. Soc. A., 1920, v. 97, p. 374; рус. пер.: УФН, 1921, т. 2, с. 192.
119. *Ферми Э.* Молекулы и кристаллы.— М.: ИЛ, 1947, с. 72.
120. *Jammer M.* The Conceptual Development of Quantum Mechanics.— N. Y.: McGraw-Hill Book Company, 1966.

Андрей Иванович Ансельм

ОЧЕРКИ РАЗВИТИЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

в первой трети XX века

Редактор Н. А. Михалина

Художественный редактор Т. Н. Кольченко

Технический редактор Е. В. Морозова

Корректоры Л. И. Назарова, Е. В. Сидоркина

ИБ № 12543

Сдано в набор 22.04.85. Подписано к печати 26.02.86. Т-06921.
Формат 60×90^{1/16}. Бумага тип. № 2. Гарнитура литературная.
Печать высокая. Усл. печ. л. 15,5. Усл. кр.-отг. 15,5. Уч.-изд. л. 16,31.
Тираж 6850 экз. Заказ № 3361. Цена 2 р. 10 к.

Ордена Трудового Красного Знамени издательство «Наука»
Главная редакция физико-математической литературы
117071 Москва В-71, Ленинский проспект, 15

Производственно-издательский комбинат ВИНТИ
140010 г. Люберцы, 10, Октябрьский пр., 403