

Румер Юрий Борисович

Введение в волновую механику

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 82-3
ББК 84-4
Р86

Р86 **Румер Юрий Борисович**
Введение в волновую механику / Румер Юрий Борисович – М.: Книга по Требованию,
2024. – 148 с.

ISBN 978-5-519-83821-4

ISBN 978-5-519-83821-4

© Издание на русском языке, оформление
«YOYO Media», 2024
© Издание на русском языке, оцифровка,
«Книга по Требованию», 2024

Эта книга является репринтом оригинала, который мы создали специально для Вас, используя запатентованные технологии производства репринтных книг и печати по требованию.

Сначала мы отсканировали каждую страницу оригинала этой редкой книги на профессиональном оборудовании. Затем с помощью специально разработанных программ мы произвели очистку изображения от пятен, клякс, перегибов и попытались отбелить и выровнять каждую страницу книги. К сожалению, некоторые страницы нельзя вернуть в изначальное состояние, и если их было трудно читать в оригинале, то даже при цифровой реставрации их невозможно улучшить.

Разумеется, автоматизированная программная обработка репринтных книг — не самое лучшее решение для восстановления текста в его первоизданном виде, однако, наша цель — вернуть читателю точную копию книги, которой может быть несколько веков.

Поэтому мы предупреждаем о возможных погрешностях восстановленного репринтного издания. В издании могут отсутствовать одна или несколько страниц текста, могут встретиться невыводимые пятна и кляксы, надписи на полях или подчеркивания в тексте, нечитаемые фрагменты текста или загибы страниц. Покупать или не покупать подобные издания — решать Вам, мы же делаем все возможное, чтобы редкие и ценные книги, еще недавно утраченные и несправедливо забытые, вновь стали доступными для всех читателей.

	<i>Стр.</i>
Глава пятая. Аналогия между оптикой и механикой	56
Глава шестая. Корпускулярная теория света	61
§ 1. Электромагнитная теория и кванты света	—
§ 2. Фотоэффект	65
§ 3. Комптон-эффект	69
§ 4. Корпускулярная теория доплер-эффекта	76
§ 5. Корпускулярная теория дифракции	78
Глава седьмая. Волновая теория материи	83
§ 1. Дифракция рентгеновских лучей	—
§ 2. Метод Лауэ	86
§ 3. Метод Бреггов	87
§ 4. Метод Дебая-Шеррера	—
§ 5. Дифракция электронов	8
Глава восьмая. Математический аппарат волновой механики	9
§ 1. Понятие оператора	94
§ 2. Функциональное пространство	—
§ 3. Разложение в ряд по ортогональным функциям	96
§ 4. Линейные трансформации и операторы	97
§ 5. Умножение операторов	100
§ 6. Унитарные преобразования	102
§ 7. Преобразование матриц к диагональному виду	—
§ 8. Собственные функции и собственные значения операторов	103
Глава девятая. Волновая механика	107
§ 1. Волновое уравнение для катодных волн в пустоте	—
§ 2. Различие между катодными и световыми волнами	109
§ 3. Интенсивность катодных волн	112
§ 4. Катодная оптика для медленных электронов в однородной среде	113
§ 5. Катодные волны в неоднородной среде	114
§ 6. Вероятностное толкование Борна	115
§ 7. Пример на вычисление допустимых значений энергии	117
§ 8. Осциллятор	121
Глава десятая. Квантовая механика Гейзенберга	122
§ 1. Классическая модель атома водорода	123
§ 2. Атом водорода по Бору. Аналогия Гейзенберга	124
§ 3. Механика оптических частот	126
§ 4. Скобки Пуассона в квантовой механике	129
§ 5. Осциллятор по квантовой механике	130
§ 6. Интенсивность спектральных линий по Гейзенбергу	132
§ 7. Эквивалентность волновой и квантовой механики	133

	<i>Стр.</i>
Глава одиннадцатая. Статистическое толкование волновой механики . . .	134
§ 1. Физические величины как операторы	—
§ 2. Чистые и смешанные состояния	135
§ 3. Возможность одновременного измерения двух физических величин	136
§ 4. Импульсные и координатные состояния системы	137
§ 5. Неравенство Гейзенберга	141
Приложение первое. Теорема Эйлера	143
Приложение второе. „Звездная“ вариация	—
Приложение третье. Система атомных единиц	144
Приложение четвертое. Счетные множества и множества, имеющие мощ- ность континуума	—
Приложение пятое. Полиномы и функции Эрмита	146

ВВЕДЕНИЕ

Механика и геометрия являются первыми точными науками, без которых невозможно изучение законов природы. Обе они возникли из потребностей повседневной жизни, в результате обобщения примитивных измерений и наблюдений, которые мы ежедневно делаем. Проследим историческое развитие обеих наук.

Геометрия, как показывает само слово, возникла из потребностей измерять земельные участки. Если пренебречь шарообразностью земли, что возможно при измерении не слишком больших участков, мы можем без большой погрешности применять в землемерии формулы плоской евклидовой геометрии. Однако при измерении больших участков, линейные размеры которых уже сравнимы с радиусом земли, законы евклидовой геометрии уже перестают быть применимыми, и надо переходить к формулам сферической геометрии. С тех пор как была установлена шарообразность земли, исчезла вера в универсальность законов евклидовой геометрии при измерении расстояний между точками на поверхности земли, однако в полной мере сохранилась вера в незыблемость этих законов при измерении расстояний в пространстве, например между двумя звездами. Эта вера в настоящее время в связи с теорией относительности оказалась изжитой. Евклидова геометрия была вынуждена сойти со своего пьедестала универсальной геометрии и заняла подобающее ей место приближенной геометрии, применимой для измерения небольших участков и расстояний.

Аналогичной оказалась и судьба классической механики. И она, подобно геометрии, возникла из потребностей жизни, в результате наблюдения движений, встречающихся в повседневной жизни. Первым законом классической механики было установленное Галилеем (1564—1642) равноускоренное падение тел под действием силы земного притяжения, но настоящим создателем классической механики по праву считается Ньютон (1642—1727). Он смог показать, что те же законы, которые управляют падением тел на землю, обуславливают и движение планет вокруг солнца. Применимость классической механики к описанию движения всех тел, с которыми приходилось иметь дело до начала нашего столетия, была источником укоренившегося убеждения в универсальности законов классической механики. Но, подобно евклидовой геометрии, механика Ньютона с развитием знаний о законах движения оказалась лишенной своего универсального значения и должна была быть рассматриваема как известное приближение, годное лишь в известных пределах.

Первое расширение механики понадобилось, когда впервые столкнулись с электронами. В противоположность всем до тех пор известным телам, движение которых приходилось наблюдать, электроны часто движутся со скоростью, близкой или сравнимой со скоростью света. В то

же время установленная Эйнштейном релятивистская механика показала, что для описания движения тел со скоростью, близкой к скорости света, классическая механика неприменима и что в этих случаях надо переходить к более общей релятивистской механике. Релятивистская механика включает в себе классическую, подобно тому как сферическая геометрия евклидову. Все зависит от того, насколько две дроби

$$\frac{\text{скорость тела}}{\text{скорость света}} \quad \text{и} \quad \frac{\text{поверхность участка}}{\text{поверхность земли}}$$

малы по сравнению с единицей. Если они намного меньше единицы, классическая механика и евклидова геометрия являются разумными приближениями, которыми и надо пользоваться.

Но классическая механика оказалась неприменимой к движению не только быстрых, но и медленных электронов; понадобилось новое, еще более глубокое расширение механики, изложению которой посвящена настоящая книга. Подобно тому как релятивистское расширение механики связано с величиной скорости света $c = 300\,000 \text{ км/сек}$, так второе расширение механики связано с величиной элементарного кванта действия $\hbar$, открытого Планком в начале нашего столетия. Появление этой величины знаменует наступление новой, квантовой эры в развитии физики. Оказалось, что не только величина скорости частицы определяет границы приложимости классической механики, но и размер ее. Если в отношении тяжелых ядер допустимо применять классическую механику, то в отношении электронов и легких ядер (протонов, α -частиц) этого уже делать нельзя. Поэтому новое расширение механики, открытое независимо друг от друга Гейзенбергом и Шредингером, часто называют микромеханикой.

Наконец, в 1928 г. П. Дирак создал релятивистскую микромеханику. Она годится для описания движения электронов, скорость которых сравнима со скоростью света.

Механика Дирака — наилучшая механика, которой мы в настоящее время владеем. Но мы сейчас далеки от того, чтобы повторить ошибку классической физики и приписать механике Дирака универсальное значение. Наоборот, поведение электронов внутри и вблизи ядра ясно указывает нам, что вне известных пределов и механика Дирака приводит к неверным результатам и должна быть заменена механикой более общей, пока еще не известной. Нащупать границы применимости современной микромеханики, найти отклонения от нее (на которые указывают с каждым годом совершенствующиеся опыты), — в этом состоит в настоящее время задача квантовой физики и осуществляется она объединенными усилиями теоретиков и экспериментаторов.

Трудно сейчас предсказать, в каком направлении должно пойти дальнейшее усовершенствование механики. Одно уже теперь ясно — оно принесет с собой разгадку тайны строения атомного ядра и значительно приблизит нас к пониманию структуры тех элементарных частиц, из которых построена материя.

ГЛАВА ПЕРВАЯ

МЕХАНИКА НЬЮТОНА

§ 1. Законы движения в механике Ньютона. В классической механике законы движения материальной точки под действием внешней силы выражаются тремя линейными дифференциальными уравнениями второго порядка:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x}{dt^2} &= F_x, \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} &= F_y, \\ m \frac{d^2 z}{dt^2} &= F_z, \end{aligned} \quad (1)$$

или в виде векторного соотношения:

$$m \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}, \quad (1a)$$

где m — масса точки, $\mathbf{F}$ — сила, действующая на точку. Эти уравнения носят название основных уравнений Ньютона. Интегрирование их дает возможность определить траекторию точки, а это и есть основная задача классической механики.

Поскольку уравнения Ньютона представляют собой систему трех уравнений второго порядка, постольку в общее их решение будут входить $3 \cdot 2 = 6$ постоянных интегрирования, так что

$$x = x(t, a_1, b_1); \quad y = y(t, a_2, b_2); \quad z = z(t, a_3, b_3)$$

или векторно:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, \mathbf{a}, \mathbf{b}).$$

Для того чтобы найти траекторию, необходимо иметь шесть уравнений для определения шести постоянных интегрирования. Обычно они задаются начальными условиями, определяющими положение материальной точки $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t_0)$ и ее скорость $\dot{\mathbf{r}}_0 = \dot{\mathbf{r}}(t_0)$ в некоторый начальный момент времени $t = t_0$. Из уравнений

$$\mathbf{r}(t_0, \mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{r}_0 \quad \text{и} \quad \dot{\mathbf{r}}_0 = \dot{\mathbf{r}}(t_0, \mathbf{a}, \mathbf{b})$$

можно определить $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, а тем самым и траекторию точки,

Начальные условия могут быть даны и в несколько другой форме, например может быть определено положение материальной точки в различные моменты времени t_1 и t_2 , причем точка в эти моменты времени будет занимать положения

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}(t_1, \mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad \text{и} \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}(t_2, \mathbf{a}, \mathbf{b}).$$

Наконец, начальные условия могут быть даны в самой общей форме в виде шести соотношений между координатами и скоростями для начального момента времени $t = t_0$:

$$f_i(x_0, y_0, z_0, \dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{z}_0) = C_i; \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, 6.$$

При этом молчаливо допускается, что мы всегда в состоянии путем соответствующих опытов с любой степенью точности определить все шесть величин для начального момента времени $t = t_0$. Как мы увидим в дальнейшем, как раз это, кажущееся очевидным, допущение неверно и заставляет пересмотреть основы механики.

§ 2. Энергия и работа сил. Помножим каждое из уравнений (1) соответственно на dx , dy , dz , сложим их и проинтегрируем вдоль некоторого пути от точки $A(x_0, y_0, z_0)$ до точки $B(x, y, z)$. Мы получим:

$$m \int_A^B \left(\frac{d^2x}{dt^2} dx + \frac{d^2y}{dt^2} dy + \frac{d^2z}{dt^2} dz \right) = \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z dz). \quad (2)$$

Выражение в правой части называется работой силы $\mathbf{F}$ вдоль пути AB . Выражение в левой части легко преобразовать:

$$\begin{aligned} m \int_A^B \left(\frac{dv_x}{dt} dx + \frac{dv_y}{dt} dy + \frac{dv_z}{dt} dz \right) &= m \int_A^B (v_x dv_x + v_y dv_y + v_z dv_z) = \\ &= m \int_A^B d \left(\frac{v_x^2}{2} + \frac{v_y^2}{2} + \frac{v_z^2}{2} \right) = \frac{mv_1^2}{2} - \frac{mv_0^2}{2}, \end{aligned}$$

где через $v_1 = \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \right)_B$ обозначена скорость в точке B , а через $v_0 = \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \right)_A$ — скорость в точке A . Выражение $\frac{mv^2}{2}$ называется кинетической энергией точки. Равенство (2) выражает, что работа численно равна приращению кинетической энергии точки.

Часто случается, что работа сил не зависит от пути, пройденного точкой, а лишь от конечных точек A и B . В этом случае выражение $F_x dx + F_y dy + F_z dz$ есть полный дифференциал. Обозначая его через dU , будем иметь:

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}; \quad F_y = -\frac{\partial U}{\partial y}; \quad F_z = -\frac{\partial U}{\partial z}. \quad (3)$$

Работа силы в этом случае равна

$$\int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z dz) = \\ = - \{ U(x_1, y_1, z_1) - U(x_0, y_0, z_0) \}, \quad (4)$$

где через $U(x_1, y_1, z_1)$ обозначено значение функции $U(x, y, z)$ в точке B и через $U(x_0, y_0, z_0)$ значение в точке A . Функция $U(x, y, z)$ носит название потенциальной функции или потенциальной энергии. Равенство (4) выражает, что работа силы численно равна убыли потенциальной энергии.

Силы, обладающие потенциалом, то-есть силы, компоненты которых выражаются при помощи соотношения (3), называются потенциальными.

Пример 1. Пусть на точку m (рис. 1) действует упругая сила F :

$$F = - \frac{dU}{dx} = - kx,$$

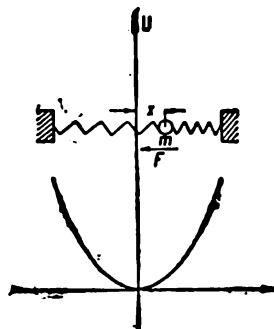


Рис. 1.

пропорциональная смещению x точки от положения равновесия. В этом случае:

$$U = \frac{k}{2} x^2,$$

направление силы лежит в сторону уменьшения потенциала.

Под действием упругой силы точка будет совершать колебания вокруг положения равновесия. Такая система называется линейным осциллятором.

Пример 2. На точку m (рис. 2) действует притягивающая сила F , обратно пропорциональная квадрату расстояния:

$$F = - \frac{dU}{dr} = - \frac{a}{r^2}.$$

В этом случае

$$U = - \frac{a}{r}.$$

Если функция U , а следовательно, и F , не зависит от времени t , то сила называется консервативной. Как на пример таких сил можно указать на кулоновские силы взаимодействия между зарядами.

Из консервативных сил особое значение имеют центральные силы. Сила называется центральной, если ее направление всегда проходит через одну и ту же точку, называемую в таком случае центром силы.

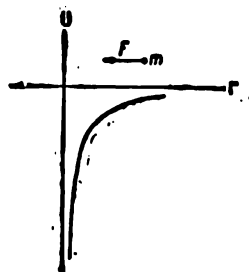


Рис. 2.

Если мы поместим начало координат в центре силы, то уравнения Ньютона примут форму:

$$\left. \begin{aligned} m \frac{d^2 x}{dt^2} &= f(r) \frac{x}{r}, \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} &= f(r) \frac{y}{r}, \\ m \frac{d^2 z}{dt^2} &= f(r) \frac{z}{r} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

или векторно:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = F(r) \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (5a)$$

причем

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Очевидно, что центральные силы являются консервативными с потенциалом

$$U(r) = - \int_0^r f(r) dr. \quad (6)$$

В самом деле, например для компоненты силы F_x имеем:

$$F_x = - \frac{\partial U}{\partial x} = - \frac{dU}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = - \frac{dU}{dr} \cdot \frac{x}{r} = f(r) \cdot \frac{x}{r}.$$

§ 3. Законы сохранения. Покажем теперь, что существуют такие соотношения между координатами и скоростью точки, которые при ее движении остаются неизменными, т. е.

$$\Phi(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \text{const.}$$

Такие соотношения называются константами или интегралами движения. Знание интегралов движения в значительной степени облегчает интегрирование уравнений механики. В случае движения точки под действием консервативной силы полная энергия точки есть интеграл движения. В самом деле, полная энергия движущейся точки складывается из кинетической и потенциальной энергии. Ее мы можем представить в виде

$$E = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + U(x, y, z)$$

или

$$E = \frac{m}{2} (\dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}}) + U(x, y, z).$$

Найдем производную полной энергии по времени и убедимся, что в силу уравнений Ньютона она тождественно равна нулю. Действительно,

$$\frac{dE}{dt} = m (\dot{\mathbf{r}}, \ddot{\mathbf{r}}) + (\dot{\mathbf{r}}, \text{grad } U) = (\dot{\mathbf{r}} [m \ddot{\mathbf{r}} + \text{grad } U]).$$

Но в силу уравнений Ньютона $m\ddot{\mathbf{r}} + \text{grad } U = 0$, а потому $\frac{dE}{dt} = 0$, и, следовательно,

$$E = \text{const.} \quad (7)$$

(закон сохранения энергии).

Покажем далее, что в случае движения под действием центральной силы кроме интеграла энергии мы имеем еще другие соотношения между координатами точки и ее скоростью, которые также являются интегралами движения.

Моментом количества движения относительно центра называется вектор $\mathbf{M}$, определяемый соотношением:

$$\mathbf{M} = m [\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}]$$

или в компонентах:

$$M_x = m (y\dot{z} - z\dot{y}), \quad M_y = m (z\dot{x} - x\dot{z}), \quad M_z = m (x\dot{y} - y\dot{x}).$$

Найдем производную момента количества движения по времени и убедимся, что в силу уравнений Ньютона она тождественно равна нулю. Действительно,

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = m [\dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}}] + [\mathbf{r}, m\ddot{\mathbf{r}}].$$

Первый член правой части явно равен нулю, второй же член на основании уравнений Ньютона есть $[\mathbf{r}, \mathbf{F}]$.

Так как центральная сила $\mathbf{F}$ и радиус-вектор $\mathbf{r}$ имеют всегда одно и то же или прямо противоположное направление, то $[\mathbf{r}, \mathbf{F}] = 0$, и, следовательно,

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = 0, \quad \mathbf{M} = \text{const.} \quad (8)$$

(закон сохранения момента количества движения).

Так как момент количества движения есть векторная величина, то закон сохранения момента количества движения дает нам три интеграла движения:

$$M_x = c_1, \quad M_y = c_2, \quad M_z = c_3, \quad (9)$$

где c_1, c_2, c_3 — постоянные.

Из закона сохранения момента количества движения вытекает как важное следствие, что под действием центральной силы движение точки происходит в одной плоскости. Для того чтобы в этом убедиться, достаточно скалярно помножить вектор $\mathbf{M}$ на радиус-вектор $\mathbf{r}$. Получим:

$$(\mathbf{M}, \mathbf{r}) = m ([\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}], \mathbf{r}) = -m (\dot{\mathbf{r}} [\mathbf{r}, \mathbf{r}]) = 0.$$

На основании (9) это дает нам:

$$c_1 x + c_2 y + c_3 z = 0,$$

т. е. координаты точки лежат в плоскости, проходящей через центр силы.

Очевидно, что задание числовой величины одного или нескольких интегралов движения равносильно заданию одного или нескольких начальных условий:

$$x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0, \quad z(t_0) = z_0,$$

$$\dot{x}(t_0) = \dot{x}_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0, \quad \dot{z}(t_0) = \dot{z}_0.$$

Так, зная величину полной энергии E , мы можем из выражения

$$\frac{m}{2} (\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2 + \dot{z}_0^2) + U(x_0, y_0, z_0) = E$$

исключить, например, $\dot{x}_0$ или x_0 .

§ 4. Кеплерова проблема. Рассмотрим один пример, который нам ясно покажет, как пользоваться интегралами движения для решения уравнений механики. Пусть точка движется в пространстве под действием центральной силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния от центра и направленной к центру:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{k}{r^2} \cdot \frac{x}{r}, \quad m \frac{d^2 y}{dt^2} = -\frac{k}{r^2} \cdot \frac{y}{r}, \quad m \frac{d^2 z}{dt^2} = -\frac{k}{r^2} \cdot \frac{z}{r},$$

или векторно:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{k \mathbf{r}}{r^3}.$$

Так как точка под действием центральной силы движется в неизменной плоскости, то мы можем за плоскость движения выбрать плоскость x, y . Тогда интегралы движения запишутся следующим образом:

Энергия:

$$E = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{k}{r} = \text{const.} \quad (10)$$

Момент количества движения:

$$M = M_z = m(x\dot{y} - y\dot{x}) = \text{const.} \quad (11)$$

Для удобства перейдем к полярной системе координат. Тогда

$$x = r \cdot \cos \varphi;$$

$$y = r \cdot \sin \varphi;$$

$$\dot{x} = \dot{r} \cos \varphi - r \sin \varphi \cdot \dot{\varphi}; \quad \dot{y} = \dot{r} \sin \varphi + r \cos \varphi \cdot \dot{\varphi},$$

откуда получаем:

$$E = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{k}{r}, \quad M = M_z = m r^2 \dot{\varphi};$$

приняв во внимание, что

$$\dot{r} = \frac{dr}{d\varphi} \cdot \dot{\varphi}$$

и исключая из выражения для энергии E величины $\dot{r}$ и $\dot{\varphi}$, получим:

$$E = \frac{M^2}{2mr^4} \left[\left(\frac{dr}{d\varphi} \right)^2 + r^2 \right] - \frac{k}{r}.$$