

А. Зоммерфельд

Строение атома и спектры

Том 2

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 53
ББК 22.3
А11

А11 **А. Зоммерфельд**
Строение атома и спектры: Том 2 / А. Зоммерфельд – М.: Книга по Требованию, 2024. – 694 с.

ISBN 978-5-458-26315-3

Классическая монография по квантовой механике, завершающая серию монографий, суммирующих большой этап развития этой весьма важной области физики. Автор является одним из создателей квантовой механики. Ему принадлежат решения многих ее задач. Во втором томе дается оригинальное и во многих разделах отсутствующее на русском языке изложение основных задач квантовой механики.

ISBN 978-5-458-26315-3

© 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.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора	8
Глава I. Введение в волновую механику. Основные положения и простейшие применения	9
§ 1. Волновое уравнение Шредингера	9
§ 2. Свободный электрон и его длина волны. Первоначальная теория де Бройля	13
§ 3. Разъяснение математических методов: шаровые функции и функции Бесселя	18
§ 4. Прохождение электронных волн через потенциальный порог. Условия непрерывности, туннельный эффект	27
§ 5. Осциллятор и ротатор, их собственные значения по волновой механике	34
§ 6. Обобщение волнового уравнения. Уравнение, зависящее от времени. Случай многих частиц	40
§ 7. Уравнение непрерывности. Ток и плотность. Нормировка и ортогональность. Статистическое толкование волновой функции	45
§ 8. Матричные элементы координат и метод векторного потенциала. Дипольное и квадрупольное излучение	52
§ 9. Нормировка, ортогональность и матричные элементы для осциллятора и ротатора	61
Глава II. Задача Кеплера	70
§ 1. Собственные значения и собственные функции в дискретном спектре	70
§ 2. Представление и свойства полиномов Лагерра. Ортогональность и нормировка. Введение гипергеометрической функции	74
§ 3. Численное и графическое представление собственных функций. Сравнение с прежними представлениями об орбитах	79
§ 4. Учёт движения ядра	83
§ 5. Правила отбора и интенсивности в задаче Кеплера	86
§ 6. Эффект Зеемана. Диа- и парамагнетизм	91
§ 7. Непрерывный спектр водорода, его собственные значения и собственные функции	100
§ 8. Ортогональность и нормировка в непрерывном спектре. Вопросы интенсивностей	107
§ 9. Задача Кеплера в параболических координатах	113
§ 10. Общие соображения относительно спектральных серий для случая одного оптического электрона и относительно симметрии атомных оболочек	120
§ 11. Теория полосатых спектров. Вращательные и вращательно-колебательные спектры двухатомных молекул	129
§ 12. Молекула как симметричный волчок	135
Глава III. Общие идеи и методы	141
§ 1. Волновые пакеты	141
§ 2. Квантовомеханическое истолкование классических величин	143
§ 3. Операторное исчисление. Операторы импульса и момента количества движения	150
§ 4. Сопряжённые операторы. Общее рассмотрение матричных элементов	158

§ 5.	Матричная механика. Пример с осциллятором	161
§ 6.	Соотношение неопределённостей	167
§ 7.	Теория представлений	171
Глава IV.	Теория Дирака	179
§ 1.	Релятивистское уравнение Шредингера	179
§ 2.	Переход к уравнению Дирака. Магнитный и механический моменты электрона	186
§ 3.	Сопряжённое уравнение Дирака. Четырёхмерный вектор тока	195
§ 4.	Пример — свободное движение электрона	199
§ 5.	Группа гиперкомплексных чисел и её подгруппы — кватернионы и бикватернионы	203
§ 6.	Инвариантность относительно преобразований Лоренца	219
§ 7.	Задача Кеплера и формула тонкой структуры	229
§ 8.	Квантовые числа, характеризующие уровни тонкой структуры. Подробное исследование собственных функций	240
§ 9.	Ортogonalность и нормировка. Правило отбора	251
§ 10.	Непрерывный спектр водорода. Отрицательные уровни энергии. Открытие позитрона	258
§ 11.	Парадокс Клейна	270
§ 12.	Поляризация воли материи	282
Глава V.	Теория возмущений	293
§ 1.	Теория возмущений Шредингера, особенно в случае вырожденных систем	293
§ 2.	Эффект Штарка	301
§ 3.	Теория дисперсии	308
§ 4.	Теория возмущений Дирака для нестационарных задач	324
§ 5.	Общие замечания о задачах столкновения. Приближение Борна	328
§ 6.	Формула Резерфорда и её обобщение	336
§ 7.	Дифракция электронов на кристаллах и вопросы интерференции	343
§ 8.	Поправка на спин как возмущение	348
§ 9.	Аномальный эффект Зеемана	362
Глава VI.	Фотоэффект	372
§ 1.	Введение и исторический обзор	372
§ 2.	Фотоэффект в K -оболочке, стационарный случай. Расчёт в полярных координатах	375
§ 3.	Обсуждение отклонения электронов вперёд. Разрешение относящегося сюда парадокса	383
§ 4.	Фотоэффект в K -оболочке с полным учётом запаздывания в параболических координатах	388
§ 5.	Коэффициент поглощения в K -оболочке	395
§ 6.	Фотоэффект в L -оболочке	401
§ 7.	Фотоэффект с точки зрения нестационарной теории возмущений	406
§ 8.	Фотоэффект для очень жёсткого излучения; релятивистская поправка	410
Глава VII.	Сплошной рентгеновский спектр	421
§ 1.	Историческое введение и обзор	421
§ 2.	Матричный элемент для элементарного процесса	425
§ 3.	Интенсивность и поляризация в сплошном рентгеновском спектре	434
§ 4.	Распределение электронов по направлениям при торможении	442
§ 5.	Полная потеря излучения	444
§ 6.	Запаздывание и опережение	446
§ 7.	Очень жёсткие лучи, первое приближение по теории Дирака	452
§ 8.	Специальное приближение для мягкого рентгеновского излучения при торможении протонов. Астрофизические приложения	471
Глава VIII.	Эффект Комптона	479
§ 1.	Общий обзор	479
§ 2.	Метод матричных элементов	481
§ 3.	Метод запаздывающих потенциалов	489

§ 4. Эффект Комптона на свободных электронах по уравнению Дирака	495
§ 5. Эффект Комптона на связанных электронах. Атомный фактор, соотношение между комптоновским и релеевским рассеянием	507
§ 6. Ширина и форма комптоновской линии	513
Глава IX. Спектр гелия и молекула водорода. Проблема химической связи	523
1. Исторический обзор	523
2. Обменное вырождение в спектре гелия. Орто- и парасостояния	526
3. Молекула водорода и гомеополлярная связь	534
4. Аналитические и численные дополнения	539
5. Волновомеханическое понимание принципа Паули	549
6. Орто- и параводород	553
7. Вопросы строения ядра. Статистика Бозе и статистика Ферми	557
8. Рассеяние одинаковых частиц	560
Глава X. Приближенные методы вычисления собственных функций	567
1. Метод Хиллерааса, основное состояние гелия	567
2. Дальнейшее развитие метода Хиллерааса. Отрицательный ион атомного и положительный ион молекулярного водорода	574
3. Статистическая модель атома Томаса—Ферми	578
4. Применение к периодической системе	583
5. Дальнейшие применения и дополнения	586
6. Метод «самосогласованного поля» Хартри	589
7. Метод Вентцеля—Крамерса—Бриллауэна	592
Математические дополнения	598
1. Введение групповой скорости. К гл. I, § 2, равенство (14)	598
2. Критерий двухчленности рекуррентной формулы. Метод полиномов. К гл. I, § 3	599
3. Гамильтонова функция электрона. О нормировке электродинамического потенциала и калибровочной инвариантности. К гл. I, § 6, Б и Г	603
4. Общие замечания о сопряженном уравнении. Вариационный принцип волновой механики. К гл. I, § 7	606
5. О мультипольном излучении. К гл. I, § 8 и гл. II, § 6 и 7	610
6. Рекуррентные формулы для сферических функций и им родственных. К гл. I, § 9 и гл. IX, § 4	625
7. Общее представление гамма-функции. К гл. II, § 7	631
8. Дальнейшие сведения о нормировке и ортогональности собственных функций. К гл. II, стр. 77 и гл. IV, стр. 253	632
9. Формула Морзе в теории полосатых спектров. К гл. II, § 12	641
10. Преобразование волнового уравнения к общим криволинейным координатам, исключение дополнительных условий. К гл. II, § 12, равенство (8)	644
11. К доказательству теоремы о центре тяжести, теоремы площадей и т. д. к гл. III, § 2	654
12. Дополнения к теоремам об операторах момента количества движения. К заключению гл. III § 3	656
13. Двухрядные и четырехрядные матрицы. Представление гиперкомплексных единиц γ через матрицы. К гл. IV, § 5	660
14. Вариационный принцип в теории Дирака. К гл. IV, § 3	665
15. Математические дополнения к релятивистской проблеме Кеплера. К гл. IV, § 7	667
16. Интегральное представление и асимптотическое поведение гипергеометрических функций. К гл. IV, § 10 и гл. VII, § 8	672
17. Относительно параметров Клейна α , β , γ , δ и значение этих параметров для теории Дирака. К последней части гл. IV, § 6	684
Алфавитный указатель	691

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Второй том книги Зоммерфельда посвящён следующему этапу развития теории атомных спектров — квантовой механике. Книга Зоммерфельда — не обычный курс квантовой механики; он не богат количеством решённых задач. Его характерная особенность (отличающая и первый том книги) — глубокое и подробное изложение основных проблем квантовой механики в таком виде, что читатель ощущает все детали пути, которым автор находит решение задачи. Автор самым подробным образом рассказывает о всех деталях расчётов, о всех возникающих и ликвидируемых парадоксах, об опытах, которые привели к постановке задачи, и об опытах, доказавших справедливость теории; он никогда не отсылает читателя к математическим книгам за подробностями об уравнениях или функциях; напротив, все математические вычисления и исследования проводятся здесь же и в столь красивой форме (особенно, когда дело касается интегральных преобразований, в которых Зоммерфельду принадлежат классические исследования), что математические разделы книги оказываются не менее интересными, чем и физические.

Чтение книги Зоммерфельда должно дать читателю яркое представление о большом этапе развития науки, полученное от одного из её активных соиздателей.

Но, конечно, книга имеет не только исторический интерес. Ряд задач, изложенных в книге (фотоэффект, рентгеновское излучение и др.), представлены с полнотой, с которой они нигде в курсах больше не излагались; и в этих вопросах книга остаётся незаменимым справочником.

Книга Зоммерфельда — яркий пример классического произведения, не утратившего своего значения через много лет после его создания.

Эта книга, однако, резко индивидуальна. Автор в основном описывает те задачи, в исследовании которых он сам принимал непосредственное участие, или те работы, которые ему были более близки. Однако книга и не предназначалась для читателя, который только начинает изучать квантовую механику. Читатель же, знающий основы этой науки, найдёт здесь огромное количество интересного и полезного для себя. Книгу Зоммерфельда бессмысленно пытаться дополнить примечаниями и новыми ссылками — сделать это с исчерпывающей полнотой невозможно; её пробелы следует восполнить чтением других книг по квантовой механике, которых сейчас много. Лишь в нескольких местах, где произошли существенные изменения в физических воззрениях, мы позволим себе добавить несколько слов в примечаниях.

Я. Смородинский

ГЛАВА I

ВВЕДЕНИЕ В ВОЛНОВУЮ МЕХАНИКУ. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ПРОСТЕЙШИЕ ПРИМЕНЕНИЯ

§ 1. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Мы часто сталкиваемся с противопоставлением макроскопических и микроскопических явлений. Так, например, макроскопическая картина состояния теплового равновесия выглядит совершенно иначе, чем микроскопическая картина, основанная на кинетической теории газов. Макроскопическими по своему существу являются механика и электродинамика. Применять к атомным процессам законы макроскопического мира значило бы, вообще говоря, предъявлять необоснованные требования к природе. Однако ряд важных успехов теории говорили в пользу такой экстраполяции в микроскопическую область. Изучение внутриатомных электронных орбит, оказавшееся столь плодотворным для общего познания атома, в особенности для расшифровки спектров, основывалось на классической механике, а методы, связанные с принципом соответствия, которыми мы пользовались при рассмотрении вопросов интенсивностей и поляризации, были заимствованы из классической электродинамики. К классическим принципам были добавлены лишь две квантовые аксиомы. Мы сформулируем их кратко, ссылаясь на уравнение (20), гл. II, § 3, I тома и уравнение (6), гл. I, § 6, I тома, в виде двух уравнений:

$$\int p dq = nh \quad (\text{квантовое условие}), \quad (1)$$

$$h\nu = E_1 - E_2 \quad (\text{условие частот}). \quad (2)$$

Первое из них определяет выделенные или стационарные состояния атома (в общем случае — изучаемой системы) и сопоставляет им целые числа («квантовые числа») n ; второе определяет излучение при переходе из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 ¹⁾.

¹⁾ В дальнейшем через E мы будем обозначать полную энергию и отличать её от энергии W , не включающей энергии, связанной с существованием массы покоя. Так, например, для отдельного электрона

$$E = m_0 c^2 + W;$$

$E_0 = m_0 c^2$ называется энергией покоя электрона; энергия W складывается в общем случае из кинетической и потенциальной энергии, причём последняя определена лишь с точностью до постоянного слагаемого. В релятивистском случае удобной мерой энергии представляется полная энергия E ; в нерелятивистском случае удобно и, как мы увидим в следующем параграфе, достаточно использовать W . Очевидно, что в (2) мы можем заменить $E_1 - E_2$ на $W_1 - W_2$.

Однако с самого начала ряд фактов указывал на то, что законы механики, даже дополненные с точки зрения квантовой теории, не вполне описывали реальную действительность. Особенно простой частный случай их несостоятельности обнаружился при рассмотрении вопроса о вращательных полосатых спектрах молекул. Для достижения согласия с опытом последние пришлось нумеровать не целыми, а полуцелыми числами (ср. рис. 138 в I томе). Такого рода примеры свидетельствовали о глубоком различии между микро- и макромеханикой.

Каким же образом можем мы без слишком большого произвола построить *микромеханику*, приспособленную к атомным явлениям? Следуя Эрвину Шредингеру¹⁾, будем исходить из всеобъемлющей аналитической системы *гамильтоновой механики*²⁾. Гамильтон развивал эту систему в связи со своими исследованиями по геометрической оптике астрономических инструментов, находясь при этом под влиянием представлений возникшей тогда (с 1828 по 1837 г.) волновой оптики.

Волновая оптика описывает оптические процессы с помощью линейных дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка и получает из них волновые поверхности (поверхности равной фазы). Световые лучи тогда определяются, по крайней мере в изотропных средах, как ортогональные траектории к волновым поверхностям.

С другой стороны, геометрическая оптика (или оптика световых лучей) была первоначально механикой световых корпускул Ньютона; световые лучи имели смысл траекторий этих корпускул; ортогонально к ним располагались волновые поверхности. Если $S = \text{const}$ — уравнение этих поверхностей, то S удовлетворяет дифференциальному уравнению в частных производных первого порядка и второй степени. Это уравнение и есть уравнение Гамильтона в частных производных, причём S означает, в соответствии с нашими прежними обозначениями т. I, гл. II, § 6, гамильтонову характеристическую функцию или «действие». Мы сразу приходим, таким образом, к дифференциальному уравнению и к функции действия для отдельной материальной точки (отдельной световой корпускулы) и без труда (используя многомерное рассмотрение) распространяем этот метод на произвольные механические системы.

Прделаем теперь путь Гамильтона в обратном направлении. В то время как Гамильтон, исходя из волновой оптики, пришёл через геометрическую оптику к общей формулировке макроскопической механики, мы, следуя Шредингеру, перейдём через геометрическую и волновую оптику от макромеханики к микромеханике. Мы хотим получить микромеханику, которая уточняет макромеханику и делает её применимой к системам атомных размеров, подобно тому как волновая оптика является уточнением геометрической для расстояний порядка длины световой волны.

Мы начнём с макромеханики отдельной материальной точки в прямоугольных координатах. Исходя из закона сохранения энергии:

$$\frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = W - V \quad (3)$$

¹⁾ Основные работы Шредингера появились в журнале *Ann. d. Phys.* в 1926 г. под заглавием «Квантование как проблема собственных значений», первое и второе сообщения в томе 79, третье сообщение в 80, четвёртое сообщение в 81; далее в томе 79: «Об отношении квантовой механики Гейзенберга — Борна — Иордана к моей». Они были объединены в монографию «*Abhandlungen zur Wellenmechanik*», Leipzig, 1927.

²⁾ Относительно происхождения гамильтоновой теории см., наряду с замечаниями, приведёнными в гл. II, § 6 I тома, также Ф. Клейн, Развитие математики в XIX столетии, т. I, гл. 5, М. — Л., 1937.

(постоянная W — энергия, V — потенциальная энергия, зависящая только от координат x, y, z), мы получим, следуя общим правилам [т. I, гл. II, § 6, уравнение (18)], уравнение Гамильтона в частных производных:

$$\Delta_1 S = 2m(W - V), \quad \Delta_1 S = \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2. \quad (4)$$

Величина Δ_1 называется «первым дифференциальным параметром» в отличие от «второго дифференциального параметра» Лапласа Δ . С другой стороны, мы напомним дифференциальное уравнение волновой оптики:

$$\Delta u = \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad \Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (5)$$

в котором u — компонента оптического поля в прямоугольных координатах, a — фазовая скорость света (вообще говоря, меняющаяся от точки к точке). Оставляя рассмотрение временной зависимости до следующего параграфа, введём монохроматическую волну:

$$u = \psi e^{\pm i\omega t}. \quad (5a)$$

Положим

$$\frac{\omega}{a} = k$$

и будем называть k «волновым числом». Это название оправдывается тем, что в случае плоской волны k оказывается равным $\frac{2\pi}{\lambda}$, где λ — длина волны, т. е. пространственный период плоской волны. Введём ещё показатель преломления n относительно вакуума (индекс 0 будет относиться к вакууму, так что a_0 есть обычная скорость света c):

$$\left. \begin{aligned} n &= \frac{a_0}{a} = \frac{c}{a}, \\ k &= nk_0. \end{aligned} \right\} \quad (5b)$$

В таких обозначениях из (5) и (5a) следует:

$$\Delta \psi + n^2 k_0^2 \psi = 0. \quad (6)$$

Совершим здесь переход к геометрической оптике, следуя в рассуждениях идеям Дебая¹⁾: в геометрической оптике мы считаем длину волны λ_0 «малой» и, следовательно, k_0 — «большим» («малая» означает: бесконечно малая по отношению ко всем встречающимся размерам оптической аппаратуры). Напишем:

$$\psi = A e^{ik_0 S}. \quad (6a)$$

Множитель q введён из соображений размерностей: поскольку S имеет размерность действия (эрг · сек), то $k_0 q$ должно обладать размерностью обратного действия. Мы будем рассматривать A и S в (6a) как «медленно меняющиеся величины», т. е. будем пренебрегать в производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \left(ik_0 q A \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial x} \right) e^{ik_0 S}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \left[-k_0^2 q^2 A \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + ik_0 q A \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + 2ik_0 q \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right] e^{ik_0 S} \end{aligned}$$

всеми степенями k_0 по сравнению с наибольшей. Тогда после сокращения

¹⁾ A. Sommerfeld u. J. Runge, Ann. d. Phys. 35, 290 (1911).

на k_0^2 уравнение (6) перейдет в

$$\Delta_1 S = \frac{n^2}{q^2}. \quad (7)$$

Это уравнение является основным для геометрической оптики дифференциальным уравнением «эйконала». Сравнение с (4) приводит к

$$n^2 = 2mq^2(W - V). \quad (8)$$

Таким образом, гамильтонова механика, если толковать её с точки зрения геометрической оптики, оперирует с переменным показателем преломления, определяемым значением V . Нечто похожее получается при рассмотрении криволинейного распространения световых лучей в воздушных слоях земной атмосферы.

Если подставить полученное значение n в дифференциальное уравнение (6) волновой оптики, то получим уравнение волновооптического варианта механики:

$$\Delta\psi + 2m(qk_0)^2(W - V)\psi = 0. \quad (9)$$

Надо ещё выбрать неопределённый пока множитель q . Мы уже отмечали, что произведение qk_0 имеет размерность обратного действия. Поэтому положим ¹⁾, вводя тем самым безразмерный множитель f :

$$qk_0 = \frac{2\pi}{h} f = \frac{f}{h}. \quad (10)$$

В следующем параграфе мы покажем, что f следует положить равным единице. Принимая это пока без доказательства, мы получим из (9) в качестве окончательного дифференциального уравнения микромеханики в простейшем случае (одна материальная точка, консервативное силовое поле)

$$\Delta\psi + \frac{2m}{h^2}(W - V)\psi = 0. \quad (11)$$

Мы будем называть это уравнение *волновым уравнением* ²⁾, ψ — *волновой функцией* и рассматривать (11) как основу *волновой механики*.

Сделаем замечание к интегрированию волнового уравнения. Задача состоит в том, чтобы найти такие интегралы ψ , которые однозначны и непрерывны во всей области изменения координат, включая и граничные точки. Появляющееся таким образом требование непрерывности, включая граничные точки, потрясающим образом полностью заменяет наше квантовое условие (1). Входящее в (1) квантовое число n возникает само собой при решении возникающей «краевой задачи». Наше квантовое условие (1) оказывается таким образом излишним в качестве самостоятельной аксиомы. Положение вещей здесь аналогично положению в краевых задачах обычной механики, например в задаче о колеблющейся струне, где также с помощью граничных условий (закрепление струны на концах) вводится целое число n .

¹⁾ После работ Дирака стало общепринятым использовать обозначение $\hbar$ для $\frac{h}{2\pi}$; мы это использовали в (10) и (11). Такое $\hbar$ появляется в квантовой механике очень часто. Несмотря на это, основной константой квантовой теории остаётся первоначальное планковское h . Это проявляется в квантовом условии (1), в выражении h^3 для элементарного объёма фазового пространства, в формулах для длины волны Комптона и де Бройля и т. д.

²⁾ Сам Шредингер использовал сперва название «волновое уравнение» для аналогичного (5) уравнения, зависящего от времени. Для отличия от (11) мы будем называть последнее «временным волновым уравнением».

характеризующее различные формы колебаний основного тона и обертонов и равное (увеличенному на единицу) числу узлов.

Чтобы сделать (в известном смысле) излишним в волновой механике и условие частот (2), мы должны прежде всего дополнить наше уравнение, вводя зависимость от времени.

§ 2. СВОБОДНЫЙ ЭЛЕКТРОН И ЕГО ДЛИНА ВОЛНЫ. ПЕРВОНАЧАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ДЕ БРОЙЛЯ

В качестве простейшего примера применения волнового уравнения мы рассмотрим движение материальной точки при отсутствии сил. Из (1.11)¹⁾ при $V=0$ имеем:

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0; \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} W. \quad (1)$$

Проинтегрируем дифференциальное уравнение так же, как и в оптической задаче о плоской волне. Выбирая в качестве выделенного направления положительное направление оси x , пишем:

$$\psi = Ae^{ikx}. \quad (2)$$

Область изменения координаты x простирается от $x = -\infty$ до $x = +\infty$. Решение однозначно и непрерывно во всей области, включая граничные точки, и удовлетворяет, следовательно, нашему общему краевому условию, и притом для каждого положительного значения W . Поэтому, в то время как в других случаях граничному условию можно удовлетворить только при специальном выборе значения энергии, здесь энергия остаётся произвольной. Если мы положим $W = \frac{mv^2}{2}$, то из (1) получится

$$k = \frac{mv}{\hbar}. \quad (3)$$

Таким образом, пространственный период нашей ψ -функции (т. е. длина волны λ) будет равен

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{mv}. \quad (4)$$

Но это есть знаменитая *формула де Бройля*, приписывающая длину волны трансляционному движению материальной точки. Действительно, Л. в и де Бройль²⁾ получил это соотношение в своей диссертации (Париж, 1924) ещё до появления работ Шредингера. Тем самым в физику был введён *принцип двойственности*³⁾, который вскоре должен был принести богатые экспериментальные плоды (Дэвиссон и Джермер, 1927) и который является самым поразительным из всех замечательных открытий этого столетия: двойственная природа света как световой волны и светового кванта

¹⁾ Запись (1.11) означает § 1, уравнение (11). Мы будем в дальнейшем всё время принимать это сокращённое обозначение, при ссылках на предыдущие главы дополнять его номером соответствующей главы (I, II, ...).

²⁾ Опубликовано в *Journal de Phys.* 7 (1926).

³⁾ Вместо двойственности по предложению Бора предпочитают говорить о *дополнительности*, чтобы подчеркнуть, что оба аспекта, корпускулярной и волновой, взаимно дополняют друг друга, причём в зависимости от поставленной задачи следует использовать иногда один, иногда другой, без опасения, что они придут в противоречие друг с другом. (*Прим. авт.*)

Понятие «дополнительности» в квантовой механике оказалось источником идеалистических философских построений, которые привели к противопоставлению этого понятия понятию причинности. См. по этому поводу, например, статью В. А. Фока [УФН 45, 3 (1951)]. (*Прим. ред.*)

переносится на электрон и далее на всю материю; наряду с её корпускулярной природой и теоретически и экспериментально устанавливается как равноправная её волновая природа.

Формальное обобщение выражения (2) (также подсказываемое обычной оптикой) на случай электрона, движущегося в произвольном направлении (α , β , γ), получается, если положить

$$\psi = Ae^{ik(\alpha x + \beta y + \gamma z)}, \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1, \quad (5)$$

что можно записать короче в виде

$$\psi = Ae^{i(kr)}. \quad (6)$$

Здесь k — волновой вектор с компонентами

$$k_x = k\alpha, \quad k_y = k\beta, \quad k_z = k\gamma. \quad (6a)$$

Ясно, что выражение (5) также удовлетворяет дифференциальному уравнению (1).

Мы приходим теперь ко второму фундаментальному положению первоначальной теории де Бройля.

Де Бройль приписывает каждой системе с энергией E или массой m частоту ν с помощью двойного соотношения Эйнштейна:

$$E = mc^2 = h\nu. \quad (7)$$

Первым из двух объединённых здесь утверждений является закон инертности энергии (т. I, гл. I, § 7), а вторым — уравнение Эйнштейна для фотоэффекта в его максимально упрощённой форме (т. I, гл. I, § 6). При этом m означает здесь не массу покоя (как в формуле $\frac{mv^2}{2}$ для кинетической энергии), а полную массу, соответствующую всей имеющейся у системы энергии.

Введением частоты ν де Бройль обобщает пространственное состояние ψ , которое определяется из уравнения Шредингера, в пространственновременной процесс

$$u = \psi e^{-2\pi i \nu t} = \psi e^{-i\omega t}. \quad (8)$$

Здесь в силу (7)

$$\omega = \frac{E}{h}. \quad (9)$$

Знак перед i в показателе в (8) сам по себе произволен, мы будем предпочитать использованный в (8) знак минус.

Возвращаясь к частному случаю плоской волны (свободный электрон) (2), напомним:

$$u = Ae^{ikx - i\omega t}. \quad (10)$$

Показатель имеет смысл «фазы» волны. Условием постоянства фазы будет

$$k dx - \omega dt = 0.$$

Отсюда мы получаем «фазовую скорость», которую мы, как и в (1.5), будем обозначать через a :

$$a = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}. \quad (11)$$

Если подставить сюда ω из (9) и k из (3), то получим ¹⁾:

$$a = \frac{E}{mv}$$

¹⁾ Здесь возникла известная непоследовательность, поскольку m означало в (7) полную массу, в то время как первоначально в (3) — массу покоя соответственно вы-