

А.Ф. Иоффе

Основания новой квантовой механики

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 53
ББК 22.3
А11

А11 **А.Ф. Иоффе**
Основания новой квантовой механики / А.Ф. Иоффе – М.: Книга по Требованию, 2014. – 128 с.

ISBN 978-5-458-57823-3

ISBN 978-5-458-57823-3

© Издание на русском языке, оформление
«YOYO Media», 2014
© Издание на русском языке, оцифровка,
«Книга по Требованию», 2014

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 первозданном 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.

ЗАТРУДНЕНИЯ ТЕОРИИ КВАНТОВ ДО «НОВОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ»

П. С. ТАРТАКОВСКИЙ

Задача этой вводной статьи предлагаемого сборника — наметить основные вехи на пути развития теории квантов со времени первых работ Бора (1913). Одержав ряд крупных побед, теория квантов потерпела в последнее время также и ряд неудач, которые обнаружили в целом ряде случаев принципиальную неприменимость ее методов и даже всего логического строя теории. В поисках новых путей теория квантов шла ощупью, часто ограничиваясь простой систематикой экспериментальных фактов. И только в самое последнее время, около года тому назад, найдена новая точка зрения и проложен путь для дальнейшего развития теории квантов.

§ 1. В применении к атомной системе та форма теории квантов, которую теперь уже можно назвать классической, основана на следующих основных постулатах.

1. *Постулат устойчивых состояний.* Из всех механически возможных состояний атомной системы «устойчив», т.-е. реально осуществим, только ряд дискретных состояний, выделяемый при помощи особых «квантовых» условий. Последние пишутся в форме

$$[1] \quad J_r = n_r h,$$

где J_r — так называемые фазовые интегралы, n_r — целые числа, h — постоянная Планка.

2. *Условие частот.* Если при переходе из устойчивого состояния с энергией E' в устойчивое состояние с меньшей энергией E'' происходит излучение, то излучаемый свет монохроматичен, и частота его определяется условием

$$[2] \quad h\nu = E' - E''.$$

Иначе говоря, излучается один квант лучистой энергии, величина которого равна теряемой атомом энергии.

То же самое условие частот [2] определяет и поглощение энергии, а именно: поглощается квант энергии, величина которого равна разности между конечным и начальным состоянием системы.

Эти два основных постулата являются выражением ряда экспериментальных фактов.

Постулат устойчивых состояний выражает то, что атомы могут существовать в определенных состояниях значительное время не разрушаясь (из всех устойчивых состояний — одно, именно состояние с наименьшей энергией, является наиболее устойчивым — нормальным; в нем атом может существовать неопределенно долгое время). Согласно классической электродинамике это невозможно, так как электрон, двигаясь с ускорением, непрерывно излучает энергию; следовательно, состояния атома с постоянной энергией вообще невозможны.

Постулат частот является основой для выражения закономерностей в спектрах; в частности уравнение [2] выражает так называемый комбинационный принцип, согласно которому частоты всех линий данного спектра могут быть представлены в виде разностей двух «термов». Уравнение [2] показывает, что величины термов пропорциональны значениям энергии атома в тех состояниях, переходом между которыми осуществляется данная спектральная линия.

Условие частот явилось логически последовательным обобщением уравнения Эйнштейна для фото-электрического эффекта, выражающего энергию фото-электрона:

$$[3] \quad E = h\nu - P.$$

К этим двум постулатам присоединяется третий — так называемый *принцип соответствия*.

В предельных случаях больших квантовых чисел квантовая теория атома и классическая электродинамика приводят к совпадающим результатам, расходясь в неопредельных случаях. Содержание принципа соответствия заключается в том, что это совпадение признается не случайным; между реальными фактами, выражаемыми квантовой теорией, и описанием явлений с классической точки зрения существует известное «соответствие», в предельных случаях переходящее в совпадение. Ряд величин, описывающих определенные стороны явлений с классической точки зрения, дают приближенное понятие об этих сторонах явлений и в неопредельных случаях, когда

классическая теория заведомо неприменима. В виду различия точек зрения классической и квантовой теории на самый механизм явлений, физическое толкование этих величин, конечно, неодинаковое. Таким образом, принцип соответствия существенно дополняет два основных постулата, давая возможность сделать заключения о тех свойствах излучения, которые двумя основными постулатами не выражаются (например, интенсивность и поляризация спектральных линий).

Из сказанного вытекает, что весь путь решения какой-либо задачи физики атома состоит в следующем:

1. Движение атомной системы (модель выбирается на основании каких-либо предварительных данных) описывается при помощи уравнений обычной механики.

2. Из всех механически возможных состояний квантовыми условиями выделяется дискретный ряд устойчивых состояний. Определяется выражение энергии устойчивых состояний, как функция квантовых чисел.

3. Применение условия частот дает спектр системы.

4. Применение принципа соответствия определяет интенсивности и поляризацию спектральных линий.

§ 2. *Выделение устойчивых состояний.* Если движение атомной системы описывается обобщенными координатами q_i и импульсами p_i , связанными каноническими уравнениями

$$[4] \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}; \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (i = 1, \dots, s)$$

$[H(p, q)]$ — Гамильтонова функция], то наиболее удобным для теории квантов методом решения механической задачи является метод Гамильтона-Якоби. Согласно этому методу вводится такая функция S (так называемое «действие»), что

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i};$$

тогда интеграл энергии дает уравнение в частных производных первого порядка для функции S , так называемое уравнение Гамильтона-Якоби.

$$[5] \quad H(p_i, q_i) = H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = E.$$

Интегрированием этого уравнения механическая задача решается до конца. Для установления устойчивых состояний это, впрочем, не представляется необходимым.

Как указал Бор, установление устойчивых состояний возможно лишь в том случае, если система обладает определенными свойствами периодичности (класс так называемых условно-периодических систем). Определенное правило для выделения устойчивых состояний получается в том случае, когда уравнение Гамильтона-Якоби интегрируется разделением переменных, т.-е. когда каждый импульс p_i является функцией только соответствующей координаты q_i :

$$[6] \quad p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} = f_i(q_i).$$

В этом случае квантовые условия пишутся в форме:

$$[7] \quad J_i = \oint p_i dq_i = n_i h. \quad (i = 1, \dots, s)$$

Интегрирование распространяется на всю область изменения координаты q_i , т.-е. на один полный оборот в случае циклической координаты q_i и на одно полное колебание в случае «либрационного» характера движения. Очевидно, что только в случае разделения переменных имеет смысл применение квантовых условий типа [7].

Это обстоятельство привело к мысли, что каждая задача имеет свою «естественную» для нее координатную систему, именно ту, в которой происходит разделение переменных и, следовательно, возможно установление дискретных состояний. Однако возможны случаи, когда установление такой координатной системы невозможно и, следовательно, установить устойчивые состояния нельзя. Выражение энергии как функции квантовых чисел n_i и дает окончательное решение задачи.

С теоретической точки зрения удобно установление устойчивых состояний при помощи так называемых угловых координат, так как при этом ясно выступает связь квантовых условий со свойствами периодичности системы.

Контактным преобразованием координаты p_i, q_i могут быть заменены такой системой координат w_i и сопряженных импульсов J_i , что все координаты q_i являются периодическими функциями w_i с периодом 1:

$$[8] \quad q_i = \sum C_{\tau_1} \dots \tau_u \cos 2\pi (\tau_1 w_1 + \dots + \tau_u w_u + \gamma_i),$$

а энергия системы, т.-е. Гамильтонова функция, зависит только от импульсов J_i :

$$H = H(J_1, \dots, J_u).$$

Число u называется степенью периодичности системы. Из гамильтоновых уравнений следует:

$$[9] \quad \dot{J}_i = -\frac{\partial H}{\partial w_i} = 0; \quad \dot{w}_i = \frac{\partial H}{\partial J_i} = \omega_i.$$

следовательно:

$$J_i = \text{Const.}, \quad w_i = \omega_i t + \delta_i. \quad (i = 1, \dots, u)$$

Импульсы J_i постоянны, координаты w_i линейные функции времени. Импульсы J_i как раз равны фазовым интегралам [7] — и мы можем, таким образом, просто положить:

$$[10] \quad J_i = n_i h. \quad (i = 1, \dots, u)$$

Мы видим, следовательно, что число независимых квантовых условий равно степени периодичности системы u . Если $u < s$ (числа степеней свободы), то система называется «вырожденной». Число «независимых» квантовых чисел для нее меньше числа степеней свободы. Точно также существование линейных зависимостей между частотами ω_i типа

$$m_1 \omega_1 + \dots + m_u \omega_u = 0$$

повышает степень периодичности u и уменьшает число квантовых условий. Существование зависимостей этого типа и есть признак «вырождения» системы.

Остановимся на установлении квантовых состояний в том случае, когда на систему действуют внешние силы, малые по сравнению с силами, действующими внутри системы. В этом случае движение системы определяется так называемым *методом возмущений*. Сперва решается задача о невозмущенном движении, определяется энергия системы H , как функция импульсов J_i . Однако в возмущенном движении величины J_i перестают быть постоянными. Мы рассматриваем потенциал возмущающих сил сперва как функцию импульсов невозмущенного движения, а затем находим новые импульсы J'_i , которые уже оказываются постоянными. Энергия возмущенной системы складывается из энергии невозмущенной системы и энергии возмущения:

$$[11] \quad H' = H + \varepsilon \Omega,$$

где Ω потенциал возмущающих сил, а ε — малый коэффициент.

Если система была вырожденной, а возмущающие силы имеют периодический характер, то степень периодичности системы может

увеличиться: появятся новые импульсы и новые квантовые числа. Если новые периоды велики по сравнению со старыми (как это имеет место, например, в случае эффекта Зеемана), то задача решается по методу вековых возмущений; вместо Ω в формуле [11] подставляется среднее значение энергии возмущения, взятое по периоду невозмущенного движения.

Мы должны еще указать на то обстоятельство, что величины, подлежащие квантованию, должны быть «адиабатическими инвариантами», т.-е. не менять своего значения, например, при медленном включении внешнего силового поля, при «адиабатическом» преобразовании системы. Этому условию как раз удовлетворяют фазовые интегралы [7].

§ 3. *Условие частот и принцип соответствия.* После того как устойчивые состояния системы установлены, спектр системы определяется автоматически путем применения условия частот. Но при этом возможно получение некоторых линий, в действительности не наблюдающихся. Устранение этих линий происходит при помощи «правил отбора», вытекающих из принципа соответствия.

Математическая формулировка принципа соответствия следующая.

Всякая из координат системы, а также общее смещение электрона, а стало-быть и электрический момент системы, могут быть выражены в виде разложения в ряд Фурье:

$$[12] \quad \xi = \sum C_{\tau_1 \dots \tau_n} \cos 2\pi[(\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_n \omega_n)t + \gamma_\tau],$$

где суммирование происходит по всевозможным комбинациям целых чисел τ_i . С точки зрения классической теории, спектр системы определяется «механическими» частотами ω_i и их комбинациями:

$$\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_n \omega_n,$$

при чем интенсивности соответствующих линий задаются квадратами амплитуд C_τ . Если для какой-либо комбинации амплитуда $C_\tau = 0$, то соответствующая линия в спектре отсутствует. Очевидно, что и поляризация излучения определяется наличием определенных членов в разложении ряда Фурье слагающей электрического момента по известному направлению. С точки зрения теории квантов, одновременного излучения всего спектра не происходит; отдельному переходу из одного устойчивого состояния в другое соответствует

излучение одной определенной спектральной линии, частота которой определяется условием частот:

$$[13] \quad \nu = \frac{1}{h} (E' - E'').$$

Принимая во внимание [9] и [7], равенство это можно переписать таким образом

$$[14] \quad \nu = \frac{1}{h} \int \sum \frac{\partial H}{\partial J_i} dJ_i = \frac{1}{h} \int \sum \omega_i dJ_i \cong \sum_1^u (n_i' - n_i'') \omega_i.$$

Но в случае больших квантовых чисел квантовая теория дает результаты, совпадающие с классической, по которой излучаемые частоты типа

$$[15] \quad \nu = \tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2 + \dots + \tau_u \omega_u;$$

чтобы [15] совпало с [14], нужно положить

$$[16] \quad \tau_i = n_i' - n_i'', \quad (i=1, \dots, u)$$

т.-е. считать, что целые коэффициенты при ω_i в разложении в ряд Фурье задают величины «квантовых скачков». Гипотетически мы экстраполируем это утверждение на случай любых квантовых чисел.

Считая, что между классической и квантовой теорией существует соответствие, мы утверждаем, что и в случае любых квантовых скачков τ квадраты амплитуд C_τ дают интенсивности спектральных линий. В виду того, однако, что механизм излучения по квантовой теории не тот, что по классической, физический смысл величин C_τ иной: для теории квантов величина C_τ^2 определяет *вероятность* перехода с квантовым скачком $\tau = n' - n''$. Равенство нулю C_τ делает соответствующий переход невозможным, и определенная линия из спектра выпадает (правило отбора).

Легко видеть, что квантовая частота излучения ν_{qu} представляет некоторую «среднюю» от классической частоты ν_{kl} , взятую между начальным и конечным состоянием. В самом деле, если положить

$$[17] \quad J_i = n_i' h + \lambda (n_i'' - n_i') h,$$

то при $\lambda = 0$ мы имеем начальное значение импульса J_i' , а при $\lambda = 1$ конечное значение J_i'' , при $0 < \lambda < 1$ — ряд промежуточных значений.

Пользуясь [17], можем записать [14] так:

$$\begin{aligned}
 [18] \quad \nu_{qu} &= \frac{1}{h} \int \sum \frac{\partial H}{\partial J_i} dI_i = \frac{1}{h} \int_0^1 \sum \omega_i \hbar (n_i' - n_i) d\lambda = \\
 &= \int_0^1 \sum \tau_i \omega_i d\lambda = \int_0^1 \nu_{kl} d\lambda,
 \end{aligned}$$

что выражает наше утверждение.

§ 4. В значительном ряде случаев намеченный путь решения задач физики атома привел к результатам, оказавшимся в прекрасном согласии с опытом. Сюда относятся прежде всего задачи о движении электрона в атоме водорода, об эффекте Штарка в атоме водорода, о нормальном эффекте Зеемана и ряд других.

Совершенно не останавливаясь на вычислениях, мы постараемся выяснить те условия, которые являются типичными для «удач» квантовой теории и для ее «неудач».

В задаче о водородном атоме мы имеем движение электрона под действием кулоновских сил притяжения к ядру атома. Если не учитывать релятивистского изменения массы электрона, то в результате вычислений получается для энергии в n -ом устойчивом состоянии известная формула:

$$[19] \quad E = -\frac{Rh}{n^2}, \quad R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3},$$

откуда получается бальмеровский спектр:

$$\nu = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n''^2} \right).$$

Если принять во внимание релятивистское изменение массы электрона при движении его по эллиптической орбите, получаем формулу Зоммерфельда:

$$[20] \quad E = -\frac{Rh}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right],$$

где k — азимутальное квантовое число, определяющее момент количества движения электрона, а α так называемая «постоянная тонкой структуры». В связи с условием частот и принципом соответствия эта формула прекрасно описывает тонкую структуру линий водорода и ионизованного гелия.

В задаче об эффекте Штарка мы имеем дело с движением электрона в поле кулоновских сил при наличии возмущающего действия внешнего постоянного электрического поля. Задача может быть решена, например, по методу возмущений и приводит к совпадающему с опытом значению для энергии.

Если атом водорода поместить в постоянное магнитное поле, то возмущающее действие поля сказывается в прецессии электронной орбиты вокруг направления поля с так называемой ларморовой частотой:

$$[21] \quad \nu = \frac{e}{4\pi mc} H,$$

где H напряжение поля, m масса электрона. Применение метода вековых возмущений дает при этом для энергии

$$[22] \quad E = -\frac{R\hbar}{n^2} \pm \bar{m}\hbar\nu,$$

где $\bar{m}$ новое квантовое число. Черта над m поставлена, чтобы не смешивать эту величину с массой электрона, входящей в выражение [21].

Правило частот и принцип соответствия дают нормальный эффект Зеемана с расщеплением линий:

$$[23] \quad \Delta\nu = \pm \nu$$

Из этих немногих примеров видно, что описанный выше логический путь теории квантов приводит к результатам, согласным с опытом в тех случаях, когда мы имеем дело с одним электроном под действием центральных сил с постоянными или медленно меняющимися возмущающими силами.

Перейдем теперь к случаям, когда в атоме имеется несколько электронов. Сюда относится прежде всего атом гелия, представляющий собой систему с двумя электронами. Каждый электрон в этой системе движется под действием кулоновского притяжения к ядру, возмущаемого отталкиванием другого электрона. Но это возмущение не может быть описано теми методами, которыми описаны возмущения постоянным электрическим и магнитным полями. Попытки Крамерса, Борна и Гейзенберга произвести расчет спектра гелия по обычному плану привели к выводу, что этот метод принципиально не приложим к этому случаю, когда на рассматриваемый электрон действуют силы, меняющиеся с частотой того же порядка, что и частоты самого рассматриваемого электрона. Эти вычисления не только не дали отчета о структуре спектра гелия, но даже привели к совер-

пенно неправильному значению для его ионизационного потенциала. Можно, следовательно, сказать, что в этом случае на электрон действуют силы такого характера, что их нельзя описать при помощи уравнений обычной механики: возникает представление о «немеханическом действии» (*unmechanischer Zwang*).

В случае, когда в атоме имеется много электронов, но один из них можно «выделить» (например, валентный электрон в щелочных металлах), наш обычный план решения задачи приводит, так сказать, к частичному успеху. В самом деле, в этом случае мы можем представить себе атом в виде некоторого «остова» (*Atomrumpf*), состоящего из ядра и внутренних электронов, в поле которого движется один валентный электрон. *Пренебрегая движениями внутренних электронов*, мы рассматриваем движение валентного электрона в поле, мало отличающемся от кулоновского. Получается для энергии выражение, дающее спектральную формулу Ридберга-Ритца:

$$[24] \quad E = - \frac{Rh}{n^{*2}}.$$

Здесь n^* так называемое эффективное квантовое число, не целое, отличающееся от истинного главного квантового числа некоторой дробью q , вообще говоря, неправильной:

$$n^* = n - q.$$

В ряде случаев можно вычислить величину q для каждой отдельной орбиты валентного электрона. На почве этой формулы можно провести систематику спектров сложных элементов с их набором термов s , p , d и т. д., проводя некоторую аналогию между орбитами валентного электрона и рядом эллиптических орбит в атоме водорода.

Однако вычисления подобного рода не могут учесть того важного факта, что в огромном большинстве случаев линии спектральных серий не простые, а сложные: двойники, тройники и т. п. Теоретически учесть расщепление спектральных термов наша схема не даст возможности. Здесь опять требуется нечто новое, какое-то немеханическое действие. В некоторых частных случаях удалось, например, объяснить величину дублета наличием у остова атома внутреннего магнитного поля, вызывающего, так сказать, «внутренний эффект Зеемана». Но последовательное проведение этого взгляда для всех случаев не оказалось возможным.

В тщетных попытках найти какой-нибудь выход теория пошла по пути, весьма странному для теоретической физики. Этот путь