

# Как квантовая механика описывает микромир

М.КАГАНОВ

*В создании физической теории существеннейшую роль играют фундаментальные идеи. Физические книги полны сложных математических формул. Но началом каждой физической теории являются мысли и идеи, а не формулы. Идеи должны позднее принять математическую форму количественной теории, сделать возможным сравнение с экспериментом.*

А.Эйнштейн

## Вступление

Когда пишешь статью, стараешься представить себе, кто будет ее читать. В этот раз вопрос о том, кто мой читатель, меня особенно волновал. Дело в том, что статья получилась несколько более сложной, чем другие мои статьи, которые публиковались раньше в «Кванте». Правда, в процессе работы над статьей я успокаивал себя тем, что она адресована молодым людям, которые *уже* интересуются физикой, читали научно-популярные статьи по атомной физике и готовы потратить определенные усилия, чтобы разобраться в том, что читают. И еще, предлагаемая статья несколько отличается от большинства научно-популярных статей, посвященных квантовой механике. Здесь главное внимание уделено не конкретным результатам, а более общим вопросам. Ее основная тема – принципиальное отличие описания движения микрочастиц от описания движения макроскопических тел.

Хотелось бы, чтобы эта статья усилила ваше желание глубже понять физику, а в дальнейшем – и избрать физику своей профессией. Вы ведь уже знаете, что в физике бесконечно много интересного...

## Как и почему?

Когда задумываешься о проблемах познания, о том, как наука объясняет строение Мира и его частей, то понимаешь, что ответить на вопрос «Почему?» гораздо труднее, чем на вопрос «Как?». Ответ на первый вопрос предполагает возможность сослаться на более общую и потому на более глубокую теорию. Но мне всегда кажется, что как только я отвечу на очередной вопрос «Почему?», немедленно последует новый вопрос и спрашивающий захочет узнать, почему справедливо то, на чем основывается ответ на первое *почему*.

На вопрос «Как?» ответить проще. Стараюсь объяснить, *как* движутся частицы или *как* они, объединя-



Иллюстрация Н.Суворовой

ясь, создают более сложные конструкции (атомы, молекулы, тела...), и *как* знание строения конструкций и сил, действующих между частями конструкций, помогает понять наблюдаемые явления и/или свойства окружающих нас тел, можно четко сказать, какая теория используется для объяснения и какие объекты воспринимаются как данные. Нет нужды пытаться объяснять, *почему* они такие. Иногда это добровольное ограничение, иногда ответа нет, скорее всего – пока.

Отсутствие ответа на вопрос «Почему?», как правило, не мешает ответить на вопрос «Как?». Более того, чаще всего именно так бывает не только в рассказе о науке, но и в научном творчестве. Знакомство с тем, как наука отвечает на бесконечно возникающие вопросы «Как?», позволяет почувствовать, где в настоящее время проходит граница познанной области.

Вот – два примера. Они помогут понять различие между обсуждаемыми вопросами.

**Первый пример.** За последние десятилетия удалось описать, *как* Вселенная развивалась с момента Большого взрыва до сегодняшней ее стадии. Многие черты развития допускают наблюдательную проверку и подтверждают высказываемые гипотезы. Для описания развития Вселенной используют законы физики, которые были открыты и сформулированы при изучении явлений совершенно иного масштаба, т.е. не пришлось создавать другую, какую-то особую *вселенскую* физику.

А *почему* произошел Большой взрыв? *Почему* законы природы такие, какие они есть, а не какие-нибудь другие? Ведь если бы законы были другими, то и Вселенная, естественно, была бы совсем иной. Возможно, такой, что в ней никогда не смогла бы возникнуть жизнь и, тем более, думающее, познающее существо.

Допустимы ли такие вопросы? Я убежден, что запрещать задавать какие-либо вопросы нельзя, хотя на некоторые из них наука дать ответ не может и не сможет. Все чаще мне приходит в голову мысль, что при любом развитии науки останутся вопросы, выбор ответа на которые диктуется верой. Разные люди выбирают разные ответы.

**Второй пример.** Квантовая механика – о которой речь пойдет в этой статье – позволила в принципе объяснить строение и свойства веществ, их разнообразие и присущие им общие черты. Здесь не место для подробностей. Подчеркну только, что в понимании того, *как* построены тела и *каковы* их свойства, фундаментальную роль играет тот безусловный факт, что ядра атомов построены из нуклонов (протонов и нейтронов), а их оболочки – из электронов. Конкретные черты всей конструкции существенно определяются тем, что электрон примерно в 2000 раз легче нуклона. Если бы частицы, несущие заряды разных знаков, имели одинаковые массы, Мир был бы совершенно иным. Мог ли бы существовать такой мир, не знаю.

Так вот, я не могу ответить на вопрос, *почему* электрон в 1840 раз легче протона. Похоже, в настоящее время никто не знает на него ответа. Значит ли это,

что все знание структуры тел и понимание их свойств не имеет основы, построено на песке? Нет, конечно. Важная черта любой науки – возможность использовать известные (или даже предполагаемые) данные о тех элементах, которыми оперирует теория, добиваясь понимания. Данные эти не объясняются, а указываются, констатируются. Если теория хорошо и достаточно полно разработана, как например квантовая теория конденсированных тел, то можно точно указать, из каких элементов построены исследуемые объекты и каковы свойства элементов конструкции. Вопрос о том, *почему* элементы имеют такие свойства, а не какие-либо другие, считается неуместным. И сам вопрос, и ответ на него принадлежат другой области физики.

### Мир объективно существует

Во фразу, вынесенную в подзаголовок, я вкладываю простой смысл: Мир такой, каков он есть. Нам (мне – точно!) представляется, что Мир познаваем. Ощущение познаваемости Мира из-за грандиозных успехов науки превращается в уверенность. Уверенность оказывается и оказывает стимулирующее действие. Но все же можно себе представить, что в будущем человечество столкнется с ситуацией, когда придется признать: *дальнейшее познание окружающего нас Мира невозможно*.

В частности, уже сейчас мы понимаем, что не можем ответить на вопрос, *почему* Мир познаваем. Ответ на этот вопрос, по-видимому, находится за пределами научных методов познания. Это, похоже, один из тех вопросов, ответ на который зависит от мировоззрения отвечающего. Ученый-атеист, не умея ответить на этот вопрос, ограничивается тем, что пытается максимально использовать *познаваемость* Мира. Ее он воспринимает как естественное свойство материального Мира. Верующий ученый в процессе научной деятельности поступает так же, как атеист, но познаваемость Мира считает, по-видимому, Божьим даром. Мое ощущение: *почему* – я не знаю, но Мир *таков*. И это все, что о нем можно сказать, с каждым днем вкладывая в слово «*таков*» все больше и больше сведений, полученных путем научного познания.

### Физика и математика

Разные ученые приходят к своим результатам очень разными путями, но (не конкретизируя) можно наметить некую общую схему пути научного познания. Не каждый ученый проходит весь путь. Чаще в процессе познания принимают участие разные ученые. Особенно, когда речь идет не о конкретном частном результате, а о создании новой науки – такой, как квантовая механика.

Начинается все с *наблюдения* и *обобщения*. Если собранные опытные факты не укладываются в существующую *теорию*, то некоторые ученые (далеко не все!) задумываются. *Необходимо* понять, в чем дело. Делаются попытки объяснить новые факты старой теорией. Неудача следует за неудачей. Кто-то, поняв, что нет надежды «подправить» старую теорию, порывает с ней – и ... рождается *новая теория*. Не вся

целиком, а либо ее элементы, либо контуры. Если новая теория справляется с объяснением опытных фактов, то ей предстоит долгая жизнь. Она совершенствуется и постепенно становится столь же строгой и логически безупречной, как и ее предшественница.

Наша статья посвящена прежде всего *теории*. Но, начиная, наверное, с Галилея, *наблюдение и обобщение* (а об объяснении и говорить не приходится) не могут обойтись без теории. Даже отбор предмета наблюдения предполагает, что наблюдение будет важно для теории. Для теории, которой пока нет! Так поступали даже в античные времена, только теперь рассуждения античных ученых трудно называть теорией.<sup>1</sup>

Теория, как мы отметили, – творение ума. Первичное и одно из наиболее важных требований к теории – ее логичность, непротиворечивость. Это требование предъявляет к теории ее создатель. В частности, именно отсюда – необходимость использовать *законные* математические действия и приемы. Принято считать, что использование математики обеспечивает логичность теории. Была даже высказана максима: «Сколько математики, столько теории». Так ли это? Теория теории разнь.

Выше я упомянул границу познания. Оставаясь на интуитивном уровне понимания этого термина, представим себе, что обнаружено или известно давно пока еще непонятое явление, «расположенное» в познательной области да еще вдали от границы познания. Мы хотим его понять, т.е. хотим построить теорию, которая объясняет явление. Непознанных явлений в познательной области сколько угодно. Говоря, что явление принадлежит *познательной области*, мы подчеркиваем нашу уверенность, что для построения теории *этого* явления фундаментальная теория существует. Значит, есть возможность строго поставить математическую задачу и использовать строгие математические методы при ее решении. И в постановке задачи, и при ее решении математика предъявляет требования к физике. Например, физик-теоретик думает, что достаточно полно сформулировал свою задачу, а математический анализ показывает, что не хватает каких-то условий (начальных или граничных). Физик задумывается, выясняет, что он упустил, формулирует и добавляет необходимые условия. Этот процесс уточнения задачи не всегда проходит так безобидно, как может показаться. Даже когда «спорящие» физик и математик – одно лицо, дискуссия может быть очень острой.

Когда физик занят исследованием в непознательной области или на самой ее границе, то ситуация в подавляющем числе случаев другая. Физик по необходимости вводит новые понятия в попытке осознать структуру и свойства тех физических сущностей, о которых пока мало что известно. Введение новых понятий заставляет наделять их чертами, которые трудно, а иногда невозможно описать апробированными математическими приемами. Иногда физик бросает математику вызов: «Что делать, если необходимо то-то

и то-то, а у вас по этому поводу ничего не сказано?» Бывает и иначе: математик, увидев, как (иногда неуклюже) физик преодолевает математические трудности, иронично замечает: «Что же вы не воспользуетесь тем-то и тем-то? Мы сомневались, нужно ли это кому-нибудь, а оказалось... Очень рады, что полученные нами результаты вам нужны».

На официальном языке два последних абзаца можно заменить одной фразой: «Физика и математика обогащают друг друга».

Хочу повторить мысль о том, что одно из самых важных требований к теории – ее логичность и непротиворечивость. И еще, что использование математики обеспечивает логичность теории. Ясно, что речь идет о пользовании *узаконенными* математическими действиями. Но иногда новые математические понятия вводит физик, лишь потом эти понятия узакониваются математиками. Самый простой пример – обобщенные функции. Наиболее известная из них – дельта-функция Дирака. Сначала ее так и величали: *дельта-функция Дирака*. Потом привыкли, и она потеряла имя того, кто ввел ее в обращение. А сделал это Поль Дирак (1902–1984) – один из создателей квантовой механики.

Иногда физик сознательно жертвует математической логикой – когда ощущает, что «жертва угодна богам». Так, релятивистская квантовая механика не может обойтись без перенормировок – определенных дополнительных предписаний. Они выходят за границы общепринятых математических правил. Но то, что «жертва угодна богам», несомненно: теория позволяет описать широкий круг явлений, добываясь баснословно точного совпадения своих предсказаний с данными опытов. Квантовая электродинамика позволяет вычислить магнитный момент электрона, и результат вычисления совпадает со значением, полученным на опыте, с фантастической, рекордной относительной точностью порядка  $10^{-10}$ . Чудо да и только! Наверное, у меня ощущение чуда – это результат недостаточно глубокого понимания мною теории. Нам часто кажется чудом то, что мы не можем объяснить. Чудо или не чудо, но, как я понимаю, незаконные операции в теории присутствуют, а перенормировки – не только общепринятый способ делать вид, что в теории все в порядке, но и возможность получать конкретные и надежные результаты. Все понимают, что построение непротиворечивой теории – дело будущего. Есть уверенность, что будущая теория среди прочих своих достижений объяснит, в чем причина успеха перенормировок.

### Атом водорода

Теперь речь пойдет о теории самого простого атома – атома водорода. Ее создал Нильс Бор (1885–1962) в 1913 году. Это была первая удавшаяся попытка



Нильс Хенрик Давид Бор

<sup>1</sup>Рекомендую прочесть книгу Э.Шрёдингера «Природа и греки» (Москва–Ижевск: R&C Dynamics, 2001). Она поможет понять место античной науки в истории естествознания.



понять строение атома и облечь понимание в формулы, допускающие убедительное сравнение теории с экспериментом. И в данном случае не обошлось без «жертвы, угодной богам».

Днем рождения квантовой физики надо считать 14 декабря 1900 года, когда Макс Планк (1858–1947) выступил со своим историческим докладом на заседании Немецкого физического общества. Убедившись,



Макс Планк

что классическая физика не может объяснить наблюдаемые законы теплового излучения, Планк понял, что опытные факты требуют ввести предположение, несовместимое с классической физикой. Он пришел к выводу, что согласия теории с опытом можно добиться, только если признать зернистость энергии осциллятора, и принял, что энергия осциллятора равна

$$E = n\hbar\omega, \text{ где } n - \text{целое}$$

число и ноль<sup>2</sup>,  $\omega$  – частота осциллятора, а  $\hbar$  – новая физическая постоянная. Постоянная естественно получила название *постоянной Планка* и скоро стала одной из важнейших мировых физических констант. Ее современное значение равно<sup>3</sup>  $1,0546 \cdot 10^{-27}$  эрг · с.

В превращении постоянной Планка в мировую константу определяющую роль сыграл Альберт Эйнштейн (1879–1955), распространив квантовый подход на широкий круг явлений – от теплоемкости твердых тел до фотоэффекта. Наименьшую порцию энергии осциллятора называли *квантом энергии*, или просто *квантом*. Квант энергии равен  $\hbar\omega$ .

Небольшой экскурс в историю физики нам понадобился, чтобы понять, из чего исходил Нильс Бор, пытаясь построить теорию атома.

Итак, Бор понимал, что есть не только *необходимость*, но и *возможность* выйти за пределы классической ньютоновской механики. Он верил недавнему (1911 г.) открытию Эрнеста Резерфорда (1871–1937) ядра атома, в котором сосредоточена масса атома и которое своими размерами приблизительно в  $10^5$  раз меньше атома. Несомненно, Бор вслед за Резерфордом, которого он считал своим учителем, глубоко проникся уверенностью, что любой атом напоминает Солнечную систему: ядро – Солнце, а электроны – планеты. Только силы, действующие между ядром и электронами, неизмеримо больше, чем силы гравитационного ньютоновского притяжения между микрочастицами. Притяжение обусловлено тем, что у ядра и электронов заряды разного знака. Они притягиваются

друг к другу кулоновскими электростатическими силами. Атом водорода – простейшая система. Он состоит из одного протона – «солнца» и одного электрона – «планеты».

Почему была *необходимость* выйти за пределы классической физики? Причина состояла в том, что классическая физика не могла объяснить *устойчивость атома*, не могла ответить на фундаментальные вопросы, почему *все атомы* одного элемента *тождественны между собой* и почему *спектр излучения* возбужденных атомов *дискретен*. Все эти вопросы и ответы на них тесно связаны между собой. Вопросы содержат *почему*. Подчеркнем: описать, *как* движутся частицы в атоме, с помощью существующей механики оказалось невозможным. Об этом – чуть подробнее.

Стабильное существование планетарной системы возможно, только если «планета» движется вокруг «солнца» и центробежная сила инерции противостоит силе притяжения. Так как протон во много раз тяжелее электрона, то можно считать, что движется только электрон. Обозначим массу электрона  $m_e$  ( $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$  г), его заряд равен  $-e$  (заряд протона  $+e = 4,8 \cdot 10^{-10}$  ед. СГСЭ), скорость электрона  $v$ . Считая что электрон движется по окружности радиусом  $a$ , имеем

$$\frac{e^2}{a^2} = \frac{m_e v^2}{a}, \text{ или } \frac{e^2}{a} = m_e v^2.$$

Стабильность объяснить, похоже, можно вращением. А тождественность? В одном атоме скорость электрона может быть больше, в другом меньше. Радиусы их будут отличаться. Возможно, существует какая-то характерная скорость? Физика уже имела в своем распоряжении характерную скорость – скорость света  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/с. Попробуем подставить это значение в приведенную формулу. Если  $v = c$ , то размер атома должен быть порядка  $10^{-13}$  см. Однако уже было известно, что атомы (даже самый легкий из них – атом водорода) значительно больше – радиус атома порядка  $10^{-8}$  см. Значит, скорость  $v$  электрона значительно меньше скорости света  $c$ , и релятивистские эффекты не должны иметь места.

Может быть, можно найти какую-то другую характерную скорость или другой характерный размер? Значением констант – величинами заряда и массы электрона – мы уже воспользовались, других констант нет. Во всяком случае, нет в пределах классической механики.

Прежде чем выйти за пределы классической (неквантовой) физики, вернемся к вопросу о стабильности. Атом, как мы отметили, стабилен с точки зрения классической механики. А как обстоит дело с электродинамикой? Согласно законам электродинамики, любое заряженное тело, двигаясь с ускорением (а движение по окружности или по эллипсу это движение с ускорением), будет излучать электромагнитные волны. Если частота обращения равна  $\omega$ , то и частота волн будет  $\omega$ . Волны унесут часть энергии электрона, он приблизится к ядру, скорость его возрастет (!), частота увеличится. Так, постепенно приближаясь к ядру и

<sup>2</sup> Может ли энергия осциллятора быть равной нулю, мы обсудим позже.

<sup>3</sup> В этой статье автор использует привычную для физиков-теоретиков *гауссову систему единиц*. (Прим. ред.)

излучая волны все более высокой частоты, электрон в конце концов упадет на ядро. Можно посчитать, сколько на это ушло бы времени, если бы такая картина имела место. По атомным масштабам, для этого нужно много времени: примерно миллион раз обернулся бы электрон вокруг ядра, прежде чем упал бы на него. А по человеческим масштабам, время жизни атома было бы совершенно ничтожным – приблизительно  $10^{-10}$  с. О какой стабильности можно говорить?!

Уменьшение энергии и одновременное увеличение скорости при приближении электрона к ядру может удивить. Не удивляйтесь: полная энергия движущегося электрона  $E$  тем больше, чем электрон дальше от ядра. Действительно, сумма потенциальной и кинетической энергий равна

$$E = -\frac{e^2}{a} + \frac{mv^2}{2}, \text{ но } \frac{mv^2}{a} = \frac{e^2}{a^2}, \text{ откуда } E = -\frac{e^2}{2a}.$$

Потенциальная энергия электрона, соответствующая

$$\text{силе притяжения } F = -\frac{e^2}{a^2}, \text{ есть} \\ U = -\frac{e^2}{a} + \text{const}.$$

Постоянную принято считать равной нулю, тогда при бесконечном расстоянии электрона от ядра энергия обращается в ноль. При отрицательной энергии ( $E < 0$ ) электрон вращается вокруг ядра, а при  $E > 0$  он не связан с ядром и может удалиться на бесконечность.

К 1913-у году Нильс Бор понимал или, по меньшей мере, надеялся, что постоянная Планка может играть роль в объяснении свойств микроскопических объектов. Давайте попробуем наряду с  $m_e$  и  $e$  включить  $\hbar$  в число величин, которые могут входить в формулы, определяющие значения скорости электрона  $v$  и радиуса его орбиты  $a$ . Нетрудно убедиться, что из соображений размерности получится

$$a = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}, \quad v = \frac{e^2}{\hbar}.$$

Лучшим доказательством правильности догадки служит численная оценка – и радиус орбиты  $a$ , и скорость  $v$  имеют нужный порядок величины:  $a \sim 10^{-8}$  см,  $v \sim 10^8$  см/с.

Результат, конечно, многообещающий. Но как двигаться дальше? Мне не хочется нарушать историческую последовательность событий. Обычно при популярном изложении в этот момент привлекают соображения Луи де Бройля (1892–1987) о существовании волн материи. Но, к сожалению, Бор этих соображений не знал – они были высказаны Луи де Бройлем лишь 10 лет спустя. Бор же исходил из того, что ему было известно.

Известно было, что энергия осциллятора *квантуется*. Согласно Планку,  $E/\omega = n\hbar$ . Энергию  $E$  осциллятора – частицы массой  $m$ , колеблющейся вдоль координаты  $q$ , можно записать следующим образом:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2},$$

где  $p = mv$  – импульс частицы. В физике часто употребляют понятие «фазовое пространство», добавляя к этим словам, к какой механической системе они относятся. *Фазовое пространство осциллятора* – это плоскость, на которую нанесена система координат: по оси абсцисс – координата  $q$ , а по оси ординат – импульс  $p$ . Выражение для энергии можно рассматривать как уравнение траектории в фазовом пространстве. Это – эллипс с полуосями  $\sqrt{2Em}$  и  $\sqrt{2E/(m\omega^2)}$ . Площадь эллипса равна числу  $\pi$ , умноженному на произведение его полуосей. Это означает, что траектория в фазовом пространстве осциллятора охватывает площадь, равную  $2\pi E/\omega$ , или  $2\pi I$ . Величина  $I$  носит название *действия*.

Теперь условие квантования можно обобщить на любое периодическое движение: *если частица совершает периодическое движение, ее действие квантуется*. Закон квантования прост: действие равно целому числу постоянных Планка, т.е.

$$I = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Подчеркнем, что условия квантования (и условие Планка, и его обобщение) в классическую механику внесены только в попытке объяснить опытные данные. В классической механике нет каких-либо выделенных траекторий. Согласно логике классической механики, возможны траектории с любым значением действия. Квантование нарушает логику классической механики.

Понимая, что «совершает преступление», Нильс Бор все же применил условие квантования к движению электрона вокруг протона. Результаты не заставили себя ждать. Оказалось, что электрон может (должен) двигаться по вполне определенным орбитам, радиусы которых равны

$$a_n = a_B n^2, \text{ где } a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Индекс «B» – в честь Бора (Bor). Величину  $a_B$  так и называют – *радиус Бора*, это минимальное расстояние, на которое электрон может приблизиться к ядру (протону). Радиус Бора с большой точностью равен  $0,5 \cdot 10^{-8}$  см. Подставив значение радиуса  $a_n$  в выражение для энергии, получим

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_n} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Попытаемся понять качественную сторону полученных результатов. Электрон в атоме может иметь только дискретные значения энергии. Мы нарочно опустили наименование атома (водород), так как в любом атоме энергии электронов дискретны. Состояние электрона с дискретной энергией – *разрешенное состояние*. По теории Бора электрон, находясь в разрешенном состоянии, хотя и движется с ускорением, но не излучает (не спрашивайте, *почему!*). Среди разрешенных состояний есть состояние с наименьшей энергией  $E_1$ . Она отрицательна, но не равна минус бесконечности, как было бы, если бы электрон упал на протон (при  $a = 0$ ). Меньшей энергии, чем  $E_1$ , электрон иметь не может.

Состояние с наименьшей энергией называется *основным*. Все остальные разрешенные состояния называют *возбужденными*. Любое возбужденное состояние не вполне стационарно. Из возбужденного состояния электрон может «перепрыгнуть» в состояние с меньшей энергией, но только в такое состояние, энергия которого разрешена.

Энергия излучается квантами  $\hbar\omega$ . Частота излучения, т.е. энергия кванта, определяется законом сохранения энергии. В процессе излучения, как во всех процессах, происходящих в природе, выполняется закон сохранения энергии. В согласии с ним, энергия излученного кванта равна

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m,$$

где  $n$  и  $m$  – целые числа и  $n > m$ . Сколько времени электрон проведет в возбужденном состоянии, зависит от ряда причин. Времена эти значительно различаются, но все они конечны. По теории Бора вычислить их нельзя.

*Электрону, находящемуся в основном состоянии, закон сохранения энергии запрещает излучать электромагнитную энергию. Основное состояние электрона в атоме устойчиво.*

Существование основного состояния обеспечивает тождественность атомов и их стабильное существование. Имеется полное согласие формулы

$$\hbar\omega_{nm} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ при } n, m = 1, 2, 3, \dots \text{ и } n > m$$

со спектроскопической картины.

Если бы задачей квантовой теории было лишь вычисление спектра атома водорода, то теорию Бора при всей ее эклектичности можно было бы посчитать выполнившей свою задачу. Задача была другой: понять, как «устроены» атомы. Но даже с построением теории атома гелия – с двумя электронами – новая теория Бора справлялась с большим трудом. И уж, конечно, она по общности и возможностям ни в какое сравнение не могла идти с классическими теориями. В конце XIX века казалось, что классической физике доступно объяснить «все на свете» с единых позиций. А у Бора вместо стройной теории – странная эклектика, по загадочной причине описывающая экспериментальные факты.

И все же значение теории Бора огромно. Впервые было показано, что объяснить свойства атомных частиц можно, только если «позвать на помощь» кванты. Правда, и сами кванты – незаконнорожденные отпрыски классической теории. Откуда они взялись? Что это за теория, когда ответ надо скорее угадывать, чем использовать привычную формулу, означающую, что теория завершена, правила выработаны и остается решать задачи, относящиеся к прерогативе теории.

С первых же дней создания теории атома водорода и Нильс Бор, и все его коллеги пытались построить *настоящую* теорию. На создание квантовой теории ушло приблизительно 15 лет. За эти годы была создана *квантовая механика*, и в понимании законов микромира произошел удивительный скачок. Без преувеличения можно сказать, что создание квантовой механики

– один из важных этапов истории цивилизации. Мир изменился за время жизни одного поколения людей. Последствия этого события будут ощущаться всегда.

### Волны? Частицы?

То, что свет имеет двойную сущность, постепенно вошло в сознание физиков. *Фотоны* стали так же реальны, как световые волны. Этому способствовал ряд экспериментальных результатов, которые получили естественное объяснение на основе подхода к свету как к потоку фотонов. Упомянем лишь два явления.

Первое явление – *фотоэффект* – это испускание электронов веществом при облучении его светом. Отметим три экспериментальных факта: максимальная кинетическая энергия  $E_{\text{кин}}$  вылетевшего из вещества электрона не зависит от интенсивности света;  $E_{\text{кин}}$  линейно зависит от частоты света; существует пороговый эффект – при частотах, меньших некоторой частоты  $\omega_0$ , фотоэффект отсутствует.

С точки зрения представления о свете как о волновом процессе, эти факты были необъяснимы. Альберт Эйнштейн объяснил их в работе 1905 года «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света». Объяснение удивительно просто: электрон поглощает свет квантами – фотонами. При поглощении фотона с энергией  $\hbar\omega$  выполняется закон сохранения энергии

$$\hbar\omega = E_{\text{кин}} + A,$$

где  $A$  – энергия, которую надо затратить, чтобы «оторвать» электрон от вещества, ее называют *работой выхода*. Все перечисленные экспериментальные факты – следствие этого равенства.

Значение упомянутой работы видно по тому, что Нобелевскую премию в 1921 году Эйнштейн получил со следующей формулировкой: «За важные физико-математические исследования, особенно за открытие законов фотоэлектрического эффекта».

Второе явление – *комpton-эффект* – это рассеяние электромагнитной волны на свободном электроне. Назван эффект в честь американского физика Артура Комптона (1892–1962). Явление «впервые с требуемой тщательностью было им изучено», хотя эффект «проявлялся уже в первых опытах по рассеянию рентгеновских лучей...» (цитирую по Физической энциклопедии).

Особенность эффекта, которую невозможно объяснить, исходя из волновых представлений о свете, – это небольшое уменьшение частоты рассеянного света по сравнению с частотой падающего света. Действительно, объяснить такое нельзя: рассеянный свет излучают электроны, под действием электрического поля световой волны они колеблются с частотой света и свет такой же частоты должны излучать.

Совершенно другая картина, если свет – поток фотонов. Фотон – частица, чем-то напоминающая снаряд. Столкнувшись с электроном, фотон, как всякая частица, часть энергии и импульса передает электрону. Энергия  $\epsilon$  и импульс  $\vec{p}$  фотона определяются его частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\vec{k}$ :

$$\epsilon = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k},$$

причем частота и величина волнового вектора связаны между собой соотношением  $\omega = ck = 2\pi c/\lambda$ , где  $\lambda$  – длина волны света, а направлен волновой вектор туда, куда движется волна. Согласно релятивистской механике Эйнштейна, энергия  $E$  электрона зависит от его импульса  $P$  следующим образом:

$$E = \sqrt{m_e^2 c^4 + c^2 P^2}.$$

Запишем законы сохранения энергии и импульса при столкновении фотона с электроном, а индексами «н» и «к» отметим начальное и конечное значения импульсов электрона и фотона:

$$E(P_n) + \varepsilon(p_n) = E(P_k) + \varepsilon(p_k), \quad \vec{P}_n + \vec{p}_n = \vec{P}_k + \vec{p}_k.$$

Расчет изменения частоты фотона теперь не представляет труда. Принято результат этого расчета приводить не в виде уменьшения частоты, а в виде увеличения длины волны рентгеновских лучей:

$$\Delta\lambda = \lambda_k - \lambda_n = \left( \frac{2\pi\hbar}{m_e c} \right) (1 - \cos\theta),$$

где  $\theta$  – угол рассеяния. Параметр размерности длины  $2\pi\hbar/(m_e c) = 2,4 \cdot 10^{-10}$  см называется *комптоновской длиной волны электрона*. Комптоновская длина волны определяет порядок величины эффекта Комптона. С развитием теории она стала играть важную роль при описании многих эффектов. Согласие измерений Комптона с формулой для  $\Delta\lambda$  подтвердило, что фотон – настоящая частица. Как каждая частица, фотон обладает и импульсом, и энергией.

В 1927 году за открытие (1922 г.) эффекта, носящего его имя, А.Комптон получил Нобелевскую премию.

Оглядываясь назад, трудно оценить, как воспринималась сделанная работа тогда. Теперь кажется все очевидным. Какие могут быть сомнения? К счастью, сохранились высказывания современников открытия. Приведем концовку статьи Эйнштейна «Эксперимент Комптона»: «...Результат опыта Комптона показывает, что излучение ведет себя так, как если бы оно состояло из дискретных корпускул, не только в смысле передачи энергии, но и в смысле передачи количества движения [импульса]». А в тексте статьи есть абзац, усиливающий оценку работы Комптона и одновременно утверждающий алогичность ситуации в физике тех лет: «...Теперь мы имеем две теории света, обе необходимые и – как приходится признать сегодня – *существующие без всякой логической взаимосвязи*, несмотря на двадцать лет колоссальных усилий физиков-теоретиков. Квантовая теория света сделала возможной теорию атома Бора и объяснила так много фактов, что она *должна* содержать значительную долю истины. [...] *Чрезвычайную важность приобретает вопрос* о том, в какой степени частицам света, или квантам, следует приписывать свойства снарядов» (выделено мной – М.К.).

Обратим внимание на то, что в статье Эйнштейна нет слова *фотон*. Нет его и в публикации Комптона. Дело в том, что слово *фотон* «родилось» заметно позже, только в 1929 году, и ввел его в употребление американский физико-химик Гильберт Льюис (1875–1946).

Алогичность и странность физической картины микромира – мира атомных и субатомных частиц – побудила Луи де Бройля высказать в 1923 году совсем неожиданное соображение: движение частицы всегда сопровождается волной. Что это за волна, теория даже не пыталась объяснить, но характеристики волны указывала. Если  $E$  и  $\vec{P}$  – энергия и импульс частицы, то частота волны  $\Omega$  и волновой вектор  $\vec{K}$  определяют так:

$$\Omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{и} \quad \vec{K} = \frac{\vec{P}}{\hbar}, \quad \text{или} \quad \hbar\Omega = E \quad \text{и} \quad \hbar\vec{K} = \vec{P}.$$

Эти соотношения получили имя Луи де Бройля. Формально они не отличаются от уравнений, с помощью которых вводятся кванты света – фотоны. Если можно читать уравнение слева направо, то, очевидно, его можно читать и справа налево. Эта простая мысль – важное эвристическое соображение.

Высказано удивительное и неожиданное предположение. Казалось бы, надо немедленно поставить эксперимент и выяснить, имеет ли гипотеза де Бройля какое-либо отношение к действительности. Лишь через четыре года, в 1927 году, в США Клинтон Дэвиссоном (1881–1958) и в Англии Джорджем Томсоном (1892–1975) была открыта дифракция электронов на кристалле, подтвердившая существование у электронов волновых свойств. За это открытие Дэвиссон и Томсон в 1937 году были удостоены Нобелевской премией.

Теоретические представления нередко опережают опыт. У них своя логика развития. В 1926 году Эрвин Шрёдингер (1887–1961) опубликовал работу, в которой сформулировал *волновое* уравнение, положившее начало одной из форм квантовой механики. Эта форма квантовой механики некоторое время именовалась *волновой механикой* и существовала наряду с *матричной механикой*. Волновая механика возникла почти одновременно с матричной, но все же чуть позже. Сначала считали, что придется выбирать между двумя формами квантовой механики. Потом не только убедились, что обе они хорошо приспособлены к описанию свойств микромира, но и пришли к выводу о полной их тождественности. Все свойства атома, которые он имеет, т.е. те, которые можно обнаружить в эксперименте и даже измерить, могут быть вычислены, найдены, предсказаны, используя решение уравнений квантовой механики. В какой именно форме, безразлично. Главное, решить задачу без ошибок.

Творцом матричной механики заслуженно считается Вернер Гейзенберг (1901–1976). В 1932 году за открытие квантовой механики в матричной форме (1925 г.) Гейзенберг получил Нобелевскую премию. Открытие, за которое были удостоены Нобелевской премией 1933 года Эрвин Шрёдингер и Поль Дирак, сформулировано так: «За открытие *новых форм* атомной теории» (выделено мной – М.К.). Главная заслуга Дирака – формулировка основ *релятивистской квантовой механики*. Но матричная квантовая механика, как и релятивистская квантовая механика, – за пределами нашего рассказа.

(Продолжение следует)



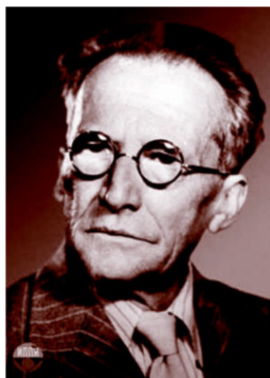
# Как квантовая механика описывает микромир

М. КАГАНОВ

**В** ЭТОЙ СТАТЬЕ РЕЧЬ ПОЙДЕТ ТОЛЬКО О ВОЛНОВОМ варианте квантовой механики и для простоты, где возможно, лишь об одной частице.

## Уравнение Шрёдингера

Попробуем понять, что руководило Шрёдингером при формулировке нового уравнения – конечно, это уравнение получило имя Шрёдингера. Правильнее было бы написать не «что руководило Шрёдингером», а *чем мог бы, по моему мнению*, Шрёдингер руководствоваться. Уже закончив эту статью, я смог познакомиться с историей создания волновой механики по



Эрвин Шрёдингер

статьям ее творца (см. книгу Э. Шрёдингера «Новые пути в физике, статьи и речи» – М.: Наука, 1971). Ход рассуждений Шрёдингера описан мною в общих чертах верно.

Все, что было привнесено в классическую физику (в механику и оптику) в попытках объяснить природу атомных и субатомных частиц, несомненно, никаким образом из основных положений классической физики не следовало. Все формулы, которые содержали постоянную Планка – и самого Планка, и Бора, и де Бройля – *привнесены, добавлены*, а не выведены. Эрвин Шрёдингер попытался построить последовательную теорию движения микроскопических частиц, сформулировать уравнение – такое, чтобы квантовые условия были необходимыми следствиями его решений. Его попытка завершилась успехом.

Задумаемся над тем, что из себя представляют уравнения классической механики и электродинамики (оптика – ее часть). И здесь не обойтись без ответа на вопрос «Почему?». Уравнения механики и электродинамики – основных наук, составляющих к началу XX века вместе с термодинамикой всю классическую физику, суть дифференциальные уравнения, т.е. они содержат не только искомые функции, но и их производные. В этом есть глубокий смысл.

События происходят в пространстве и во времени.

Зная состояние в начальный момент, мы должны с помощью фундаментальных уравнений уметь определить, что будет происходить дальше, в последующие моменты времени. И прежде всего – через бесконечно малый интервал времени  $dt$ . Перемещение в пространстве требует умения описывать бесконечно малый сдвиг в пространстве – сдвиг, равный дифференциалу  $d\vec{r}$  ( $d\vec{r}$ , как и радиус-вектор  $\vec{r}$ , имеет три проекции:  $dx$ ,  $dy$ ,  $dz$ ). Именно поэтому фундаментальные уравнения должны содержать и содержат не только величины, определяющие состояние, но и их производные. Ньютону для создания механики пришлось разработать специальный математический аппарат – анализ бесконечно малых. Его тогда еще не было.

Уже дважды было упомянуто слово «состояние». Как в классической физике описывается состояние? Рассмотрим два примера.

**Первый пример** – движение частицы массой  $m$  под воздействием силы  $\vec{F}$ , зависящей от координаты  $\vec{r}$ .

Уравнение Ньютона позволяет решить любую задачу о движении частицы. В понятие состояния частицы, несомненно, входит ее положение в момент времени  $t$ . Но знания координаты частицы  $\vec{r} = \vec{r}(t)$  мало. Чтобы уметь определить траекторию, т.е. судьбу частицы в любой произвольный момент времени, надо, кроме координаты частицы в момент времени  $t$ , знать и ее скорость  $\vec{v} = d\vec{r}/dt$  в тот же момент. Координата  $\vec{r}$  и скорость  $\vec{v}$  полностью определяют состояние частицы. Вместо скорости  $\vec{v}$  удобнее задавать импульс  $\vec{p} = m\vec{v}$ . Раньше (см. первую часть статьи) мы говорили, что физики часто вводят фазовое пространство. Фазовое пространство одной частицы это 6-мерное пространство  $(\vec{r}, \vec{p})$ . Оно объединяет в одно пространство трехмерное координатное и трехмерное импульсное пространства. Состояние частицы изображает точка в фазовом пространстве.

Выпишем для полноты и уравнение Ньютона в выбранных переменных:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}(\vec{r}).$$

**Второй пример** – электромагнитная волна.

Не будем уточнять, идет речь о световой волне или о радиоволне. Важно то, что в любой электромагнитной волне колеблются и электрическое и магнитное поля. Этот пример придется разобрать подробнее, так как он для нас очень важен.

Уравнения электродинамики сформулировал Джеймс Клерк Максвелл (1831–1879). Одно из важных достижений максвелловской электродинамики – вывод о том, что в пустом пространстве могут распространяться электромагнитные волны. Состояние волны нам известно, если известны значения напряженностей полей – электрического  $\vec{E}$  и



магнитного  $\vec{H}^1$  – во всех точках пространства (при любом  $\vec{r}$ ) в данный момент времени  $t$ . Иными словами, состояние волны описывается двумя функциями:  $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t)$  и  $\vec{H} = \vec{H}(\vec{r}, t)$ . Теория дает возможность подробно изучить свойства электромагнитных волн. Эксперимент их прекрасно подтверждает. Упомянем два свойства, которые помогут облегчить изложение.

1) Электромагнитные волны поперечны: в распространяющейся вдоль оси  $z$  волне векторы напряженностей  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  лежат в плоскости  $x, y$ .

2) Векторы  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  перпендикулярны друг другу.

Выберем оси координат так: ось  $x$  – вдоль вектора  $\vec{E}$ , ось  $y$  – вдоль вектора  $\vec{H}$ , ось  $z$ , как мы уже говорили – вдоль волнового вектора  $\vec{k}$  ( $k_x = 0, k_y = 0, k_z = k$ ). В этом случае уравнения Максвелла выглядят сравнительно просто:

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H_y}{\partial t}, \quad -\frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{1}{c} \frac{\partial E_x}{\partial t}.$$

Индексы « $x$ » и « $y$ » обозначают, каковы отличные от нуля компоненты векторов  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$ ; выражения  $\partial\Phi/\partial z$  и  $\partial\Phi/\partial t$  – частные производные от функции  $\Phi = \Phi(z, t)$ ; скорость света, как всегда, обозначена буквой  $c$ .<sup>2</sup>

Из уравнений Максвелла легко выводится *волновое уравнение*. Ему удовлетворяют обе функции:  $E_x = E_x(z, t)$  и  $H_y = H_y(z, t)$ . Выпишем волновое уравнение для напряженности электрического поля:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = 0.$$

Почему уравнение называется волновым? Потому что его решение описывает волну. Решение уравнения можно записать по-разному – либо в виде действительной функции:

$$E_x = A \cos(kz - \omega t + \alpha),$$

либо в виде комплексной функции:

$$E_x = A \exp(i(kz - \omega t + \alpha)),$$

где  $A$  и  $\alpha$  – действительные постоянные числа, зависящие от конкретной постановки задачи. Подставляя эти функции в волновое уравнение, убеждаемся, что обе они удовлетворяют уравнению, а его следствием служит связь между частотой и модулем волнового вектора:  $\omega = ck$ , а для *фотона* – между энергией и модулем импульса:  $\epsilon = cp$ . Напомним:  $\epsilon = \hbar\omega$  и  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ; если  $k_x = k_y = 0$ , то  $k = k_z$ ,  $p = p_z$ ; в общем случае  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ , а  $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ .

Сделаем важное замечание по поводу использования комплексных чисел и комплексных функций. Единственным оправданием их использования здесь и вообще в классической (неквантовой) физике служит удобство. В данном случае – то, что  $d(e^x)/dx = e^x$ , а  $e^{ix} = \cos x + i \sin x$  (последняя формула называется формулой Эйлера). Конечно, и  $E_x$  и  $H_y$  – действительные величины. Как же иначе, если  $e\vec{E}$  –

<sup>1</sup> Напряженность  $\vec{H}$  магнитного поля определяет тот вклад в магнитную индукцию  $\vec{B}$ , который дают внешние источники поля. (Прим. ред.)

<sup>2</sup> Не могу удержаться, чтобы не напомнить следующее. Формулируя экспериментальные результаты Майкла Фарадея (1791–1867), установившего связь электрических и магнитных свойств, Максвеллу необходимо было ввести множитель, связывающий разнородные (электрические и магнитные) величины. Этот множитель был обозначен буквой  $c$ . Когда оказалось, что численно множитель  $c$  равен скорости света, стала ясной электромагнитная природа света.

сила, действующая на электрон со стороны электрического поля, а магнитное поле  $\vec{H}$  определяет силу Лоренца  $(e/c)[\vec{v}\vec{H}]$ , действующую на движущийся электрон. Найдя решение в комплексной форме, мы *обязаны* взять от полученного выражения действительную часть ( $Re$ ):

$$E_x = A \cdot Re(\exp(i(kz - \omega t + \alpha))),$$

а

$$Re(\exp(i(kz - \omega t + \alpha))) = \cos(kz - \omega t + \alpha).$$

Выражение для  $E_x$  можно, естественно, получить без использования комплексных чисел.

Вернемся к уравнениям де Бройля (см. первую часть статьи). В дальнейшем энергию и импульс частицы мы будем обозначать так:  $\epsilon$  – энергия, а  $\vec{p}$  – импульс. Спутать с фотоном трудно: о нем пока не будет идти речь.

Первая задача, которую ставил перед собой Шрёдингер, была задача об энергетическом спектре атома водорода. Необходимо было найти уравнение, из которого бы *следовали* вычисленные Бором уровни энергии электрона, вращающегося вокруг ядра (протона). Ведь уровни, хотя они и были получены искусственно, с нарушением логики, прекрасно соответствовали данным опыта – спектру излучения и поглощения атома водорода. Понимая, что релятивистские осложнения при описании движения электрона в атоме водорода можно до поры до времени не учитывать, Шрёдингер использовал нерелятивистскую механику. Шрёдингер – создатель *нерелятивистской волновой (квантовой) механики*.

У свободно движущейся нерелятивистской частицы  $\epsilon = p^2/(2m)$ , а, согласно уравнениям де Бройля,  $\epsilon = \hbar\omega$  и  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  (мы заменили также обозначения частоты и волнового вектора). Запишем волновое уравнение, решение которого  $A \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \alpha))$  должно приводить к следующему соотношению между частотой и волновым вектором:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2.$$

Присутствие постоянной Планка  $\hbar$  в этом выражении – свидетельство о квантовом генезисе волновых свойств частицы. С электромагнитными волнами было строго наоборот: для волнового описания ( $\omega = ck$ ), конечно, не нужна постоянная Планка. С помощью постоянной Планка осуществляется переход к фотону.

Итак, нам надо найти уравнение, решение которого есть  $A \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \alpha))$ . Так как  $\vec{k}\vec{r} = xk_x + yk_y + zk_z$ , то это довольно просто. Обозначим искомое решение буквой  $\Psi$ . Для того чтобы функция  $\Psi$  равнялась  $A \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t + \alpha))$ , необходимо, чтобы уравнение, которому функция  $\Psi$  удовлетворяет, имело вид

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right).$$

А зачем, собственно говоря, вводить частоту и волно-

вой вектор? Не проще ли функцию выразить через энергию и импульс:  $\Psi = A' \exp((i/\hbar)(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t))$ ? Фазу  $\alpha' = \hbar\alpha$  мы включили в постоянную  $A'$ , которая теперь комплексна.

Перепишем предыдущее уравнение, умножив его на  $\hbar$ . Подстановка в него решения  $\Psi = A' \exp((i/\hbar)(\vec{p}\vec{r} - \epsilon t))$ , естественно, приводит к правильному соотношению

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m}.$$

Мы получили нужное соотношение, ничего не зная о природе  $\Psi$ -функции. Несомненно,  $\Psi$ -функция – необычная физическая величина: она комплексна и ограничиться ее действительной частью нельзя. Ни действительная, ни мнимая части  $\Psi$ -функции найденному уравнению не удовлетворяют. То, что эти соображения не остановили Шрёдингера, – свидетельство его удивительной интуиции.

Среди задач квантовой механики важное место занимают задачи, в которых частица или система частиц имеют определенную энергию. Это может быть либо изолированная система, либо система, находящаяся под действием постоянной силы. Задача о свободной частице, несомненно, принадлежит к классу таких задач. В дальнейшем только такими задачами мы и будем заниматься.

Выделим из  $\Psi$ -функции ее зависимость от времени:

$$\Psi = \psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i\epsilon t}{\hbar}\right)$$

и получим уравнение для стационарной, не зависящей от времени волновой функции  $\psi = \psi(\vec{r})$ :

$$\epsilon\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right).$$

Нам предстоит трудный шаг, связанный с введением операторов. Термина *оператор* не следует бояться, он не скрывает ничего таинственного. Например,  $\partial/\partial x$  – оператор дифференцирования. Если функция стоит справа от оператора дифференцирования, то ее следует продифференцировать. Вот и все...

Сделаем важное утверждение: *каждой механической величине в квантовой механике соответствует оператор*.

Как вводятся операторы, мы покажем на примере трех операторов проекций составляющих импульса. Свободно движущаяся частица имеет импульс  $\vec{p}$ . Проекция импульса  $\vec{p}$  на оси координат равны  $p_x, p_y, p_z$ . Операторы, соответствующие проекциям импульса, обозначим  $Op_x, Op_y, Op_z$  и запишем

$$Op_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad Op_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad Op_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}.$$

$\Psi$ -функцию свободной частицы с импульсом  $\vec{p}$  мы знаем. Подействуем на нее операторами  $Op_x, Op_y, Op_z$  и получим

$$Op_x \Psi = p_x \Psi, \quad Op_y \Psi = p_y \Psi, \quad Op_z \Psi = p_z \Psi.$$

Если действие какого-либо оператора на функцию сводится к умножению на константу, то такую функцию называют *собственной функцией этого оператора*, а значение константы – *собственным значением оператора*. В согласии с определением, если частица имеет импульс, равный  $\vec{p}$ , то это означает, что волновая функция есть собственная функция оператора

$$Op_{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}, \quad \text{заданного соответствующими проекциями:}$$

$$\Psi_{\vec{p}} = \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \exp\left(-i\epsilon(\vec{p}) \frac{t}{\hbar}\right), \quad \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = A' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right),$$

$$\epsilon(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}.$$

Надеюсь, вы понимаете, что пока мы лишь вводили новые обозначения, но не продвинулись дальше соотношений де Бройля. Часто разумно выбранные обозначения помогают продвинуться вперед.

Воспользовавшись определениями операторов, перепишем уравнение для  $\Psi$ -функции:

$$\epsilon\Psi = \frac{1}{2m} \left( (Op_x)^2 + (Op_y)^2 + (Op_z)^2 \right) \Psi.$$

Стоящий в правой части оператор по своему смыслу есть оператор кинетической энергии. Если к кинетической энергии добавить потенциальную энергию  $U(\vec{r})$ , то получится полная энергия. Если к оператору кинетической энергии добавить потенциальную энергию<sup>3</sup>, то получится оператор энергии ОН:

$$OH = \frac{1}{2m} \left( (Op_x)^2 + (Op_y)^2 + (Op_z)^2 \right) + U(\vec{r}).$$

Буква «Н» выбрана потому, что энергия, выраженная через импульс и координату, называется функцией Гамильтона (W. Hamilton, 1805–1865). Полученное выражение определяет оператор Гамильтона – *гамильтониан*.

Вот теперь можно вслед за Шрёдингером продвигаться вперед.

Для того чтобы решить задачу о квантовом движении частицы, находящейся под действием силы  $\vec{F} = -\partial U(\vec{r})/\partial \vec{r}$ , надо найти *собственные функции и собственные значения гамильтониана*, т.е. решить *уравнение Шрёдингера*, которое мы запишем в трех различных, но тождественных друг другу видах:

$$OH\Psi = \epsilon\Psi,$$

$$\frac{1}{2m} \left( (Op_x)^2 + (Op_y)^2 + (Op_z)^2 \right) \Psi + U(\vec{r})\Psi = \epsilon\Psi, \quad (1)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + (\epsilon - U(\vec{r}))\Psi = 0, \quad \Delta\Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}.$$

Теория уравнений такого типа математиками уже была разработана.

<sup>3</sup> В том варианте квантовой механики, которая здесь излагается, оператор координаты есть оператор умножения, т.е. фактически любую функцию координаты при переходе к квантовой механике заменять оператором не надо.

### Решение уравнения Шрёдингера

Легко представить себе, какую радость испытал Шрёдингер, когда найденные им уровни энергии электрона в атоме совпали с теми, которые были получены Нильсом Бором, а уровни энергии осциллятора совпали с теми, которые навязал осциллятору Макс Планк для объяснения законов теплового излучения. Правда, оказалось, что квантовый осциллятор не может не колебаться. Даже в основном состоянии, т.е. в состоянии с наименьшей возможной энергией – энергией *нулевых колебаний*  $(1/2)\hbar\omega$  – осциллятор колеблется. Уровни энергии осциллятора таковы:

$$\epsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3... - \text{целые числа.}$$

Нулевые колебания – специфическая квантово-механическая черта. Несколько слов о них будет сказано ниже. Заметим, что и электрон в основном состоянии в атоме водорода движется: среди значений  $n$  в формуле Бора нет значения  $n = 0$ .

Математическая теория решений уравнений вида уравнения Шрёдингера довольно сложна. Вывести формулы Бора и Планка нам здесь не удастся. Отметим только: для решения уравнения Шрёдингера необходимо сформулировать граничные условия для  $\Psi$ -функции – в обеих задачах (об осцилляторе и об атоме водорода)  $\Psi$ -функция на бесконечности должна обращаться в ноль. То, что вычисленные по теории Шрёдингера уровни энергии электрона в атоме водорода и осциллятора *точно* совпали с результатами Планка и Бора, – специфическая особенность именно этих задач. Из теории Шрёдингера следуют условия квантования, использованные Планком и Бором. В общем случае метод Бора и Планка – квантование *классического действия* – справедлив только тогда, когда действие велико, т.е.  $n \gg 1$ . Справедливость формул Планка и Бора при произвольных значениях числа  $n$  – в каком-то смысле удача.

Чтобы показать, как естественно возникают квантованные (дискретные) уровни энергии, мы рассмотрим простейшую задачу. Пусть частица, способная двигаться только вдоль оси  $x$ , «заперта» в потенциальной яме шириной  $2d$  с бесконечно высокими потенциальными стенками, т.е.  $U = 0$  при  $|x| \leq d$  и  $U = \infty$  при  $|x| \geq d$ . Искомая  $\Psi$ -функция подчиняется простому уравнению (см. третье из уравнений (1))

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0, \quad k^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}. \quad (2)$$

Граничное условие в данном случае таково:  $\Psi = 0$  при  $|x| = d$  (это нетрудно показать). Уравнению удовлетворяют и  $\Psi = \cos kx$  и  $\Psi = \sin kx$ . Граничное условие выбирает допустимые значения  $k$ . Итак, при  $|x| \leq d$

$$\Psi_n^s = A^s \cos kx, \quad kd = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \\ n = 0, 1, 2, 3... - \text{целые числа}, \quad (2a)$$

$$\Psi_n^a = A^a \sin kx, \quad kd = n\pi, \quad n = 1, 2, 3...$$

О значениях постоянных  $A^s$  и  $A^a$  скажем ниже, верхние индексы ( $s$ ,  $a$ ) отмечают тот факт, что косинус – симметричная функция, а синус – асимметричная.

Разрешенные значения энергии частицы представляют две серии значений:

$$\epsilon_n^s = \frac{\hbar^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2}{d^2}, \\ n = 0, 1, 2, 3... - \text{целые числа}, \quad (26) \\ \epsilon_n^a = \frac{\hbar^2}{2m} n^2 \frac{\pi^2}{d^2}, \quad n = 1, 2, 3...$$

Как у электрона в атоме, у частицы в потенциальной яме есть основное состояние, наименьшее значение энергии в котором равно  $\epsilon = (\hbar^2/2m)\pi^2/(4d^2)$ . Отметим: частица не может «лечь на дно ямы» – энергия основного состояния отлична от нуля, при этом чем яма уже, тем энергия основного состояния больше.

И еще одну такую же простую задачу мы сформулируем, а решение оставим читателям для упражнения. Речь пойдет о прохождении через непреодолимый для классической частицы потенциальный барьер. По-прежнему будем считать, что частица может двигаться только вдоль оси  $x$ , а потенциальная энергия  $U(x) = U_0 > 0$  при  $|x| \leq d$  и  $U = 0$  при  $|x| \geq d$ . Это и есть простейший потенциальный барьер. Во всяком случае для частиц с энергией  $\epsilon < U_0$ . Итак, пусть на потенциальный барьер слева падает частица с волновым вектором  $k$  ( $k = p/\hbar$ ,  $p$  – импульс,  $p = p_x$ ). Решив задачу, вы убедитесь, что волновая функция слева от барьера будет суммой двух волн – падающей (волновой вектор  $k$ ) и отраженной (волновой вектор  $-k$ ); справа от барьера волновая функция – волна с волновым вектором  $k$ , уходящая от барьера. Получить этот результат и вычислить амплитуды прошедшей и отраженной волн можно, если выяснить, что представляет собой решение уравнения при  $|x| \leq d$ . Надо только добавить: при  $x = \pm d$  функция  $\Psi(x)$  и ее производная  $d\Psi/dx$  непрерывны. И это условие тоже нетрудно вывести.

### Что же такое $\Psi$ -функция?

Значение открытия Шрёдингера не в том, что с помощью его уравнения были получены уже известные результаты. Фундаментально важно то, что они получены единообразно. Каждая задача – частный случай единой теории. Теория – волновая механика – предоставила естественную возможность двигаться вперед, формулировать новые задачи.

Один из важнейших результатов новой теории – возможность рассматривать системы, состоящие из нескольких частиц. Оказалось, что способ описания систем в волновой механике с помощью  $\Psi$ -функции существенно отличается от описания классических волн. Остановимся на этом вопросе. Это даст возможность осторожнее относиться к  $\Psi$ -функции, не переносить на нее буквально свойства классических волн. Кстати, напомним: полная волновая  $\Psi$ -функция всегда комплексна.



Нам предстоит сравнить описание движения двух классических частиц, двух классических волн и двух квантовых частиц.

Пусть две классические частицы 1 и 2 движутся в одном силовом поле, не взаимодействуя друг с другом (последнее – только для простоты). Каждая частица движется по своей траектории:  $\vec{r}_1 = \vec{r}_1(t)$ ,  $\vec{r}_2 = \vec{r}_2(t)$ . Обе траектории – кривые (прямые – частный случай) в трехмерном пространстве.

Пусть есть две классические волны – например, радиоволна 1 и световая волна 2. Каждая из волн описывается своей функцией, своей зависимостью от времени и координат в пространстве:  $\Phi_1 = \Phi_1(\vec{r}, t)$ ,  $\Phi_2 = \Phi_2(\vec{r}, t)$ . Как и траектории частиц, волны «существуют» в привычном нам трехмерном пространстве.

В обоих классических примерах движение двух объектов описывается двумя функциями. Они могут быть скалярными, векторными или более сложными. Так, электромагнитная волна распространяется в виде двух векторов. И все же в классическом описании есть притягательная наглядность: нечто движется в трехмерном мире.

Описание движения двух квантовых частиц устроено совершенно иначе и лишено наглядности. К сожалению, у нас нет возможности привести аргументы. Ограничимся только констатацией – утверждениями без объяснений. «Устроено» описание совсем не так, как описание двух классических волн:  $\Psi$ -функция двух частиц – функция семи переменных. Переменные – дважды по три координаты ( $x_1, y_1, z_1$  и  $x_2, y_2, z_2$ ) и время  $t$ . Лучше сказать так: волновая функция двух частиц – функция двух трехмерных радиусов-векторов  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$  и времени  $t$ , т.е.  $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$ .

Для описания поведения  $N$  частиц приходится использовать пространство размерности  $3N$ . Его называют *конфигурационным пространством*.

Давайте в этом месте остановимся и задумаемся. Известные нам способы описания движения классических объектов можно рассматривать как абстракцию чувственных восприятий. Действительно, траектория – просто след трассирующей пули. Сложнее с электромагнитной волной. Трудно себе сейчас представить, но для создания Максвеллом электродинамики, как теоретического описания результатов Фарадея, ему понадобились какие-то теперь всеми забытые шестеренки. Но волна в трехмерном пространстве сама по себе – прекрасный образ, заставляющий вспомнить зрительно наблюдаемые волны на поверхности воды или на натянутом канате.

С  $\Psi$ -функцией совсем иначе. Прежде всего, она комплексна. А когда с помощью  $\Psi$ -функции надо описать движение  $N$  частиц, то приходится прибегнуть к  $3N$ -мерному пространству. О какой абстракции чувственного восприятия можно говорить?! Невозможно себе представить четырехмерное пространство. Описать можно пространство любого числа измерений, а представить – нет. Похоже, квантовая механика оперирует более абстрактными понятиями, чем классическая физика, а  $\Psi$ -функция более «удалена» от объекта, который она описывает, чем величины, используемые в классической (неквантовой) физике.

Вернемся к одной частице, чтобы понять, как с помощью  $\Psi$ -функции можно получить информацию, допускающую сравнение с экспериментом.

В классической механике *состояние* одной частицы описывается двумя векторами: радиусом-вектором  $\vec{r}$  и импульсом  $\vec{p}$ . Величины, характеризующие состояние, могут быть непосредственно измерены<sup>4</sup>. Задача теории (классической механики) указать, каковы значения  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$ . Есть непосредственная возможность сравнить с экспериментом величины, определяющие состояние.

Состояние электромагнитной волны характеризует значениями амплитуд волн электрического и магнитного полей в любой момент времени  $t$ . И они могут быть измерены. Можно измерить такие волновые характеристики, как частота и длина волны. Электромагнитная волна может быть полностью восстановлена, а результат можно сравнить с теорией.

$\Psi$ -функция, несомненно, описывает *частицу*. Когда речь идет об электроны, то о частице (именно, как о частице!) многое хорошо известно: заряд, масса. Никто никогда не встречался с порцией заряда, меньшей заряда электрона. И масса и заряд электрона непосредственно измерены.

Состояние частицы в квантовой механике описывает  $\Psi$ -функция – это один из постулатов квантовой механики. Более того, слова *состояние* и  $\Psi$ -*функция* – синонимы. Согласившись с этим, мы имеем право задать такие вопросы:

Что конкретно мы знаем о частице, если нам известна ее  $\Psi$ -функция?

Какие величины, входящие в  $\Psi$ -функцию, можно сравнить с результатами опытов?

Нет приборов, с помощью которых можно непосредственно измерить  $\Psi$ -функцию. Нужен способ, позволяющий извлечь необходимую информацию. Каков он? Способ должен быть достаточно общим. Иначе с каждой новой задачей физику придется изобретать новый способ. В частности, именно этого и хотели избежать творцы квантовой механики.

Ответить на заданные вопросы помогут примеры, осмыслив которые мы сформируем алгоритм, пригодный для любых задач.

Обратимся сначала к задаче о частице в потенциальной яме (мы об этом уже говорили). Пусть известно, что волновая функция частицы есть  $\psi_0 = A^s \cos kx$ , а  $kd = (1/2)\pi$ , т.е.  $n = 0$ . Очевидно, энергия частицы в этом состоянии имеет значение  $\epsilon_0^s = (\hbar^2/(2m))\pi^2/(4d^2)$ . Если бы мы сумели измерить энергию частицы, отсчитанную от дна потенциальной ямы, то несомненно получили бы именно это значение. А если бы измерили частоту, излучаемую частицей при переходах из состояния с большей энергией в состояние с меньшей, то наверняка бы обнаружили, что квант энергии  $\hbar\omega$  равен разности двух значений энергии из выписанных выше формул. Хотя обычно в реальных экспериментах с атомными и субатомными частицами имеют дело с большими коллективами частиц, в данном случае нет никаких сомнений, что каждый отдельный электрон в

<sup>4</sup> Мы не останавливаемся на том, как происходит измерение. Измерение – сложная самостоятельная задача. Нам важно здесь подчеркнуть, что измерить координату и импульс частицы можно.

потенциальной яме будет иметь тот самый спектр значений энергии, который указан формулами (2). Эксперимент можно проводить со многими частицами или повторять много раз. Результаты (скажем, спектр излучения) будут тождественны.

А что еще известно о частице в потенциальной яме, доступное сравнению с экспериментом? Пожалуй, ничего. По крайней мере, пока... И скажем откровенно, в понимании  $\Psi$ -функции мы совсем не продвинулись. Ведь для того чтобы получить нужное значение энергии, и было сформулировано Шрёдингером уравнение для непонятно что из себя представляющей  $\Psi$ -функции.

Вернемся к постановке задачи о частице в яме. Теперь обратимся к первому из уравнений (1). Мы видим, что наша задача состоит в том, чтобы найти собственные функции оператора Гамильтона и его собственные значения. Формулы (2) решают эту задачу. Запомним этот факт в более абстрактной формулировке:

*Когда  $\Psi$ -функция – собственная функция оператора физической величины, то собственное значение, соответствующее этой функции, это значение физической величины частицы, состояние которой – данная  $\Psi$ -функция.*

Мы подчеркиваем этот факт вторично. Первый раз, когда вводили оператор импульса.

Теперь задумаемся над результатом той задачи, которую я предложил вам в виде упражнения, – о прохождении частицей потенциального барьера. По условию задачи волна, описывающая движение частицы, приближается слева к барьеру, частично отражается от него, а частично проходит через барьер и движется от него вправо. Таким образом, вне барьера есть три волны. Все они описывают движение частицы (частицы, а не частиц!) с определенным импульсом. Справа от барьера  $\Psi$ -функция описывает состояние частицы с импульсом, равным  $\hbar k$ , как и падающая на барьер волна. А вот  $\Psi$ -функция, отразившаяся от барьера, описывает частицу с импульсом  $-\hbar k$ . Можно ли проверить это странное утверждение? И да и нет.

Если направить *одну* частицу на барьер и попытаться обнаружить эту частицу за барьером летящей от него, то результат предсказать нельзя: иногда частица будет обнаружена, иногда не будет. То же самое – при попытке обнаружить частицу, отразившуюся от барьера: иногда будет обнаружена, иногда нет. При повторении эксперимента два-три раза никакая закономерность не проявится. А если повторять эксперимент многократно, закономерность начнет проявляться: чем больше амплитуда прошедшей волны, тем чаще будут обнаруживаться частицы справа от барьера; чем больше амплитуда отраженной волны, тем чаще будут зафиксированы частицы, отразившиеся от барьера.

Выше описан мысленный эксперимент. Но вот описание вполне реального опыта – дифракции электронов на кристалле. Вспомните – этот эксперимент служит (с опозданием, правда) несомненным доказательством предположения де Бройля.

Рассмотрим рассеяние электронов на кристаллической решетке внимательно, наблюдая за каждым элек-

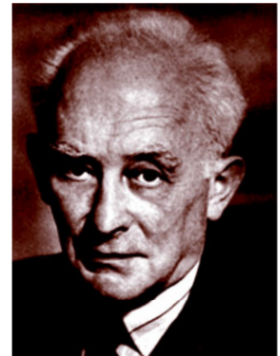
троном. Обнаружение электрона, отразившегося от кристалла, проявляется в появлении на фотопластинке маленького пятнышка. Размер пятнышка определяется величиной зерна фотопластинки. Чем зерно меньше, тем меньше пятнышко. Есть уверенность: имей мы пластинку с бесконечно малым зерном, мы убедились бы, что электрон обнаруживает себя во вполне *определенной точке* пространства. Положение точки случайно. При повторении опыта электрон – точка на пластинке – появляется то в одном случайном месте, то в другом. Ничего похожего на дифракцию.

Наблюдая за отражением большого числа электронов (последовательно или одновременно – безразлично), убедимся: каждый отдельный электрон засвечивает фотопластинку в совершенно случайном месте, но при большом числе электронов, засветивших пластинку, вырисовывается дифракционная картина, на ней отчетливо различимы места скопления точек (туда попало много электронов) и места, куда электроны не попали вовсе. Дифракционная картина очень похожа на ту, которая наблюдается при рассеянии рентгеновских лучей.

Так же, как в случае прохождения частицы через потенциальный барьер, теория рассеяния электронов на кристалле строится путем решения уравнения Шрёдингера для *одного* электрона, но при этом правильно описывает результаты опыта со многими электронами. Мы начинаем понимать, что в  $\Psi$ -функции скрыта информация, относящаяся не к одному электрону, а к ансамблю электронов.

Макс Борн (1882–1970)

в том же 1926 году, когда Эрвин Шрёдингер сформулировал свое уравнение, высказал идею о смысле волновой функции. Он понял, что величина  $|\Psi|^2 dx$  определяет *вероятность* попадания частицы в состоянии  $\Psi(x, t)$  в интервал  $dx$  между точками  $x$  и  $x + dx$ . Если  $\Psi$ -функция – функция радиуса-вектора  $\vec{r}$ , то  $|\Psi(\vec{r})|^2 dV$  определяет



Макс Борн

вероятность попадания частицы в элемент объема  $dV = dxdydz$  вокруг точки с координатами  $x, y, z$ ;  $|\Psi|^2$  – квадрат модуля комплексного числа  $\Psi$ ,  $|\Psi|^2 = \Psi * \Psi$ , звездочка (\*) означает комплексное сопряжение. Надо подчеркнуть, что для стационарных задач  $|\Psi|^2 = |\psi|^2$  не зависит от времени.

Максу Борну принадлежат и другие фундаментальные работы по квантовой механике. В 1954 году он был удостоен Нобелевской премии по физике с простой и выразительной формулировкой: «За работы по квантовой механике».

В нашем изложении первое нетривиальное следствие идеи Борна – возможность определить константы  $A^s$  и  $A^a$  у волновых функций частицы в потенциальной

яме. Условие их определения таково: вероятность обнаружить частицу в потенциальной яме должна быть равна единице. Ведь частица там есть! Нарисуем функции  $|\Psi_n^s(x)|^2$  и  $|\Psi_n^a(x)|^2$ , а значения констант  $A^s$  и  $A^a$  выберем так, чтобы площадь под кривыми равнялась единице. Условие будет выполнено. В данном случае  $A^s = A^a = \sqrt{1/d}$  для всех значений  $n$ . Напомним, что ширина потенциальной ямы равна  $2d$ .

Пытаясь проверить утверждение Борна о смысле  $\Psi$ -функции на примере частицы, находящейся в *определённом* состоянии внутри ямы, мы вынуждены были бы иметь дело с ансамблем тождественных объектов. Одиночное измерение, как и в случаях, рассмотренных раньше, дало бы совершенно случайный результат.

Описание волновой механики Шрёдингера мы начинали с рассмотрения свободной частицы, волновая функция которой – плоская волна. Но для плоской волны  $|\Psi(\vec{r})|^2$  есть константа, т.е. вовсе не зависит от координаты. Это значит, что свободную частицу с равной вероятностью можно обнаружить в любой точке пространства. Напомним: импульс у нее имеет вполне определенное значение.

### Соотношения неопределенностей

Создан строгий математический аппарат квантовой механики. Он хорошо разработан и позволяет решить (в принципе, конечно) любую задачу, которая относится к «ведомству» квантовой механики. Самое точное решение не позволяет выйти за пределы вероятностного, статистического подхода. Поэтому полученные в результате ответы, как правило, относятся к большому числу частиц, к ансамблям частиц, а не к отдельным изолированным частицам.

Еще один поясняющий пример. Предположим, мы хотим решить задачу о столкновении двух частиц. В нашем макроскопическом мире такое грустное событие, как столкновение (например, дорожное происшествие), может быть рассмотрено с любой степенью подробности. Каждый из нас знает, с какой дотошностью представители дорожной милиции изучают следы, чтобы нарисовать траектории столкнувшихся машин. В квантовой механике такой подход принципиально невозможен хотя бы потому, что микрочастица не движется по траектории. Ее движение описывается  $\Psi$ -функцией. Некоторые характеристики столкновения достоверны. Как правило, те, которые являются следствием законов сохранения энергии и импульса.

Описание столкновений в достоверных терминах называют *кинематическим* описанием. Кинематического описания столкновения недостаточно. Необходимо знать, как часто (или как редко) происходят столкновения. Квантовая теория дает возможность вычислить вероятность столкновения с тем или другим исходом, разрешенным кинематикой столкновения. Мерой вероятности служит величина размерности площади, именуемая *эффективным сечением рассеяния*. По величине этого сечения физики, занятые исследованием столкновений в мире микрочастиц, ясно представляют себе, имеют они дело с редким, трудно наблюда-

емым явлением или с явлением, легко доступным обнаружению.

Мы уже говорили, что когда  $\Psi$ -функция – собственная функция оператора физической величины, то собственное значение, соответствующее этой функции, есть значение данной физической величины. Позволяет ли квантовая механика выяснить, каковы будут результаты измерения физической величины в том случае, когда  $\Psi$ -функция не есть собственная функция оператора физической величины, которая нас интересует? Однозначный ответ получить нельзя. Но можно выяснить, какие значения будут получаться при измерении и с какой вероятностью.

Общее правило требует разложить  $\Psi$ -функцию по собственным функциям оператора той физической величины, значения которой мы измеряем.<sup>5</sup> Квадрат модуля коэффициента при собственной функции, соответствующей определенному значению физической величины, пропорционален вероятности получить при измерении именно это значение физической величины.

Для определенности повторим сказанное на примере измерения импульса. Мы знаем, что из себя представляет оператор импульса и каковы собственные функции этого оператора (собственные функции оператора импульса – плоские волны). Какие значения импульса  $\vec{p}$  и с какими вероятностями мы получим при измерении импульса электрона, находящегося в потенциальной яме, или электрона в атоме водорода? Для получения ответа надо разложить  $\Psi$ -функцию по плоским волнам. Коэффициент разложения зависит от импульса  $\vec{p}$ , а квадрат его модуля пропорционален вероятности того, что измеренное значение окажется равным  $\vec{p}$ .

Один из фундаментальных результатов квантовой механики – выявление факта существования пар физических величин, которые не могут одновременно иметь точные значения. Естественно, обе они описывают движение одной частицы. Называют их *сопряженными величинами*. С одной парой мы уже встретились – это импульс и координата. Если частица имеет определенное значение импульса, то, как мы видели, ее координата полностью не определена. Существуют соотношения – *соотношения неопределенностей*, указывающие максимально возможную степень точности пары значений сопряженных величин. Сформулируем соотношение неопределенностей для  $x$  и  $p_x$ . Пару составляют проекции радиуса-вектора  $\vec{r}$  и импульса  $\vec{p}$  на одну ось. Знание вероятностей значений физических величин позволяет определить их средние значения. Обозначать средние значения будем и большими буквами и угловыми скобками (и так и так).

Пусть частица находится в каком-то состоянии, а  $X$  и  $P_x$  – средние значения ее координаты и проекции импульса. Мерой *неопределенностей* координаты  $x$  и

<sup>5</sup> Разложение по собственным функциям напоминает разложение произвольного вектора  $\vec{A}$  в трехмерном пространстве по трем ортогональным ортам  $\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3$ :  $\vec{A} = (A n_1) \vec{n}_1 + (A n_2) \vec{n}_2 + (A n_3) \vec{n}_3$ . Роль ортов играют собственные функции. Важное свойство оператора любой физической величины состоит в том, что собственных функций всегда хватает для разложения.



проекции импульса  $p_x$  могут служить следующие *средние* величины:

$$\delta x = \sqrt{\langle (x - X)^2 \rangle}, \quad \delta p_x = \sqrt{\langle (p_x - P_x)^2 \rangle}.$$

Соотношение неопределенностей утверждает:

$$\delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3)$$

Наименьшее, *непреодолимое* значение произведения неопределенностей равно  $\hbar/2$ .

Важное следствие соотношений неопределенностей – нулевые колебания, о которых мы упоминали. Если бы энергия осциллятора равнялась нулю, то это означало бы, что ее импульс и координата (оба) равны нулю, что невозможно. По той же причине в основном состоянии электрон в атоме водорода имеет конечную энергию. Объяснение многих характерных квантовых явлений основано именно на соотношениях неопределенностей.

Неравенство (3) вывел Вернер Гейзенберг в 1927 году. В том же году Нильс Бор сформулировал *принцип дополнительности*, согласно которому у *любой* физической величины есть дополнительная – компонента пары, которая не может быть точно определена вместе с ней. Соотношения неопределенностей (типа (3)) являются математическим выражением принципа дополнительности, который сыграл важную роль в понимании структуры квантовой механики.



Вернер Гейзенберг

Вероятностный, статистический характер предсказаний квантовой механики озадачивал и озадачивает многих. Очень трудно себе представить, что ответ на поставленный вопрос о поведении микрочастицы – ответ максимально возможной определенности – содержит лишь вероятность того, что произойдет, а не точное предсказание результата. Трудно привыкнуть к тому, что для экспериментальной проверки теории, построенной на основании уравнения, описывающего движение *одной* частицы, экспериментировать в большинстве случаев необходимо не с одной частицей, а с ансамблем частиц.

Дополнительность, статистический характер описания объектов микромира, как и отказ от наглядности, – все это с трудом преодолевалось не только рядовыми физиками, но и самими создателями квантовой механики.<sup>6</sup> Тот факт, что решение многих задач

квантовой механики не заканчивается решением ее фундаментальных уравнений, а требует «перевода» на язык, принятый в классической физике, и невозможен без использования статистического подхода, до настоящего времени у некоторых вызывает неудовлетворенность. Из-за этого до сих пор продолжают поиски улучшения аппарата квантовой механики. Попыток было много, но ни одна не была успешной.

Иногда можно прочесть, что квантовая механика противоречит принципу причинности, детерминизму. Обычно выражаются осторожнее – механическому детерминизму. Но и это не так. Согласно уравнению Шрёдингера, состояние развивается вполне детерминированно: изменение движения обусловлено действием сил, а реакция частицы и системы частиц никогда не опережает причину.

Большинство физиков-теоретиков считают нерелятивистскую квантовую механику идейно завершенной, логически безупречной наукой. На протяжении уже многих десятилетий она служит надежной основой понимания свойств не только атомов и молекул, но и разнообразных макроскопических систем: твердых тел, жидкостей, плазмы...

Как физика описывает явления, происходящие в природе, а также свойства макроскопических тел – отдельная серьезная тема. Нерелятивистская квантовая механика – одна из тех базовых наук, которые служат основой описания для других дисциплин. Как всякая математизированная наука, квантовая механика требует строгой постановки и применима отнюдь не ко всему на свете. К сожалению, на объектах материального мира нет каких-либо меток – указаний, какой теорией надо (можно) пользоваться при описании их свойств или при объяснении происходящих с ними явлений. Одно из важнейших качеств опытного физика – *умение до понимания* свойства и/или явления *почувствовать*, на базе какой теории надо искать понимание. На этом этапе возможны неожиданности. Накоплен огромный опыт и понято множество явлений и свойств на основе нерелятивистской квантовой механики. Она так зарекомендовала себя, что успешно используется даже в инженерной практике – при создании различных приборов и устройств.

### Принцип соответствия

Если бы «сражения» революций естествознания нуждались в знаменах, то на знамени релятивистской революции красовалась бы скорость света  $c$ , а на знамени квантовой революции – постоянная Планка  $\hbar$ . Для перехода от новой механики Эйнштейна к старой классической механике Ньютона надо устремить скорость света к бесконечности. Фактически пренебрегают высокими степенями отношения  $v/c$ , где  $v$  – скорость частицы (тела).

От квантовой механики к механике Ньютона можно перейти, если приравнять  $\hbar$  нулю. Вот – пример. При  $\hbar = 0$  исчезает туннельный эффект. Потенциальный барьер становится непрозрачным для частиц, если их энергия меньше его высоты. Решив ранее предложен-

<sup>6</sup> В статье 1953 года Макс Борн убеждает Эрвина Шрёдингера (!), что без использования теории вероятности при описании свойств атомных и субатомных частиц обойтись невозможно, а в некрологе 1961 года возвращается к этому вопросу. Очевидно, один из создателей квантовой механики ушел из жизни, так и не признав полностью «окончательность» ее структуры. То, что подобные сомнения не покидали Альберта Эйнштейна до конца жизни, я знал, а с точкой зрения Шрёдингера познакомился, когда писал эту статью.

ную мной задачу, вы в этом убедитесь. Так и должно быть по законам классической механики.

Но не всегда переход так прост. В выражении для дискретных уровней энергии электрона в атоме водорода постоянная Планка  $\hbar$  стоит в знаменателе. Нет возможности просто положить ее равной нулю. Рассмотрим этот случай подробнее.

Чтобы не возвращаться к началу статьи, выпишем еще раз формулу Бора:

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_n} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

При классическом подходе электрон, движущийся вокруг протона, может иметь любую энергию  $E < 0$  (напомним: потенциальную энергию на бесконечности мы выбрали равной нулю). При переходе к классическому пределу должна исчезнуть дискретность уровней, т.е. при произвольном  $n$  отношение

$$\frac{\Delta E}{|E|} = \frac{E_{n+1} - E_n}{|E_n|}$$

должно обратиться в ноль при  $\hbar = 0$ . Согласно формуле Бора,  $\Delta E/E = (2n+1)/(n+1)^2$ . Как перейти к пределу? Надо выразить  $n$  через  $E$ , а *потом* устремить  $\hbar$  к нулю. Нетрудно убедиться, что  $\Delta E/|E|$  в пределе действительно обращается в ноль.

Обязательность предельного перехода от квантовой механики при  $\hbar = 0$  к классической носит название *принципа соответствия*. Когда речь идет о соответствии формул, встречающиеся трудности чаще всего похожи на ту, которая возникла с формулой Бора, и легко преодолимы. Иногда приходится вспомнить, что формула описывает чисто квантовый эффект, а классической формулы нет вовсе, не с чем сравнивать.

Иногда принцип соответствия используют менее радикально – как метод вывода приближенных формул в условиях, когда действие  $I \gg \hbar$ . Тогда принцип соответствия используется для приближенного решения квантовой задачи. Слова «принцип соответствия» заменяют словами «квазиклассическое приближение». Используя квазиклассическое приближение, приравнивают классическое значение действия целому числу постоянных Планка:  $I = n\hbar$ ,  $n \gg 1$ . Из равенства  $I = n\hbar$  следует, что расстояние между соседними уровнями равно  $\Delta E = \hbar\omega$ , где в *данном случае*  $\omega = 2\pi/T_{\text{кл}}$ , а  $T_{\text{кл}}$  – период движения частицы по классической траектории.

Квазиклассическое приближение часто весьма облегчает решение задач. Содержащуюся в волновой функции информацию формулируют в терминах классической физики. Без этого невозможно сравнение теории с экспериментом. Можно сказать иначе: квантовая механика не может обойтись без классической. Все это весьма осложняет «взаимоотношение» между квантовой механикой и классической. Аккуратный анализ предельного перехода от квантовой механики к классической – непростая задача, не будем на ней останавливаться.

## Заключительные замечания

Заканчивается рассказ о том, *как* описывают свойства объектов микромира. Заглавие статьи по существу содержит не вопрос, а ответ: *свойства микрочастиц описывает квантовая механика*. Существуют разные способы построения квантовой механики. Мы избрали самый доступный для изложения вариант, так как он позволяет познакомиться с описанием движения объектов микромира, не привлекая *весь* математический аппарат квантовой теории. Многое, правда, не объяснено, а лишь обозначено. Понять квантовую механику так, чтобы самому решать задачи, научно-популярной статьи недостаточно. Чтобы освоиться в квантовой механике, необходимо изучить весь ее математический аппарат, привыкнуть к нему. Последнее возможно, если использовать квантовую механику в своей практической деятельности.

Наибольшая трудность квантовой механики – непредставимость основного объекта, для описания которого она создана. Этот объект – *микрочастица*.

Что есть частица? Утверждение о корпускулярно-волновом дуализме, т.е. о корпускулярно-волновой двойственности, ничего не разъясняет. Как ни называй, но ведь частицы ведут себя по-разному: *то* как волны, *то* как частицы. И *представить* себе я этого не могу. Лев Давидович Ландау (1908–1968, Нобелевская премия 1962 г.) утверждал, что огромное достижение – понимать, не представляя. Можно сказать и так. Много раз я повторял это высказывание с некой гордостью за физиков и физику. Гордость, несомненно, звучит и в словах Ландау. Но в этот раз я неожиданно подумал: ведь можно иначе поставить ударение, признав, что нам *не хватает* воображения: «Понять можем, а *представить* – нет». Интуитивный этап творчества для большинства невозможен без наглядного образа. Решение каждой задачи – пример пусть иногда довольно примитивного, но все же творчества. И мы все знаем, как помогает наглядность. Может быть, я несколько преувеличиваю, но о себе я знаю это точно.

Непредставимость основных понятий заставляет создавать разнообразные наглядные образы. Атом изображают то в виде солнечной системы, рисуя орбиты, которых нет; то в виде атомного ядра, окруженного странно анизотропной атмосферой; а иногда просто в виде шарика. Одно изображение удобно в одном случае, другие – в других. Все картинки играют лишь вспомогательную роль. И все имеют мало общего с атомом, каков он есть, согласно квантовой механике. Атом – конструкция. Ядро и окружающие его электроны – его составные части. Если не вдаваться в подробности, не пытаться уточнять свои представления, то «картинка» сама возникает: ядро, окруженное электронами. А вот электрон я действительно не могу себе представить...

*Я благодарен Льву Ильичу Розенозру за несколько ценных замечаний. Они были учтены в окончательном тексте статьи.*