И Н С Т И Т У Т
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И Я Ф 76 - 47

Ю.Б.Румер

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА - 50 ЛЕТ

(доклад)

Новосибирск
1976

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

Препринт

Ю.Б.Румер

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА - 50 ЛЕТ

(доклад)

Новосибирск
1976

Анаксагор /Фалесу/

Какие доводы представить,
Чтобы взгляд превратный твой исправить?

Фалес

Природы превращенья шире,
Чем смена дня и ночи в мире.
Во всем большом есть постепенность,
А не внезапность и мгновенность,

Анаксагор

Но здесь внезапный был толчок...

Гете "Фауст"

"Если он не ожидает неожиданного, то не найдет сокровенного и трудно находимого".

Гераклит

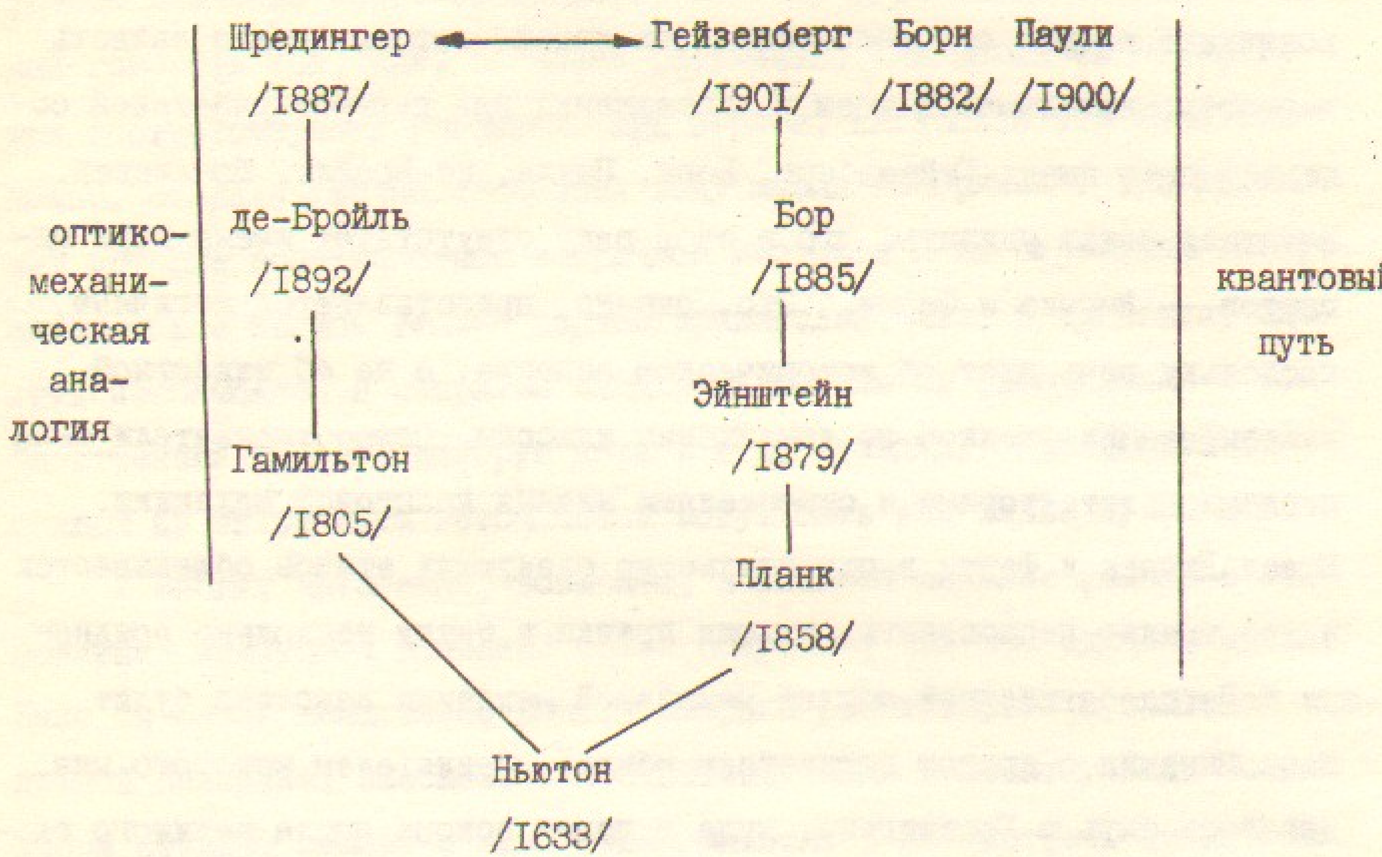
I. Введение

Период возникновения и становления матричной механики по времени почти совпал с открытием волновой механики, родившейся из совершенно иного, нежели матричная механика, круга идей о существовании аналогии между оптическими и механическими явлениями. Создатель оптико-механической аналогии Вильям Гамильтон был королевским астрономом в Дублине. Он обратил внимание на сходство между распространением лучей в оптически неоднородной среде и движением частицы в заданном потенциальном поле и придал этому сходству строгий математический вид. Позднее, этой проблемой заинтересовался крупнейший математик XIX века Феликс Клейн, один из создателей знаменитой геттингенской математической школы. По поводу работ Гамильтона он писал: "Гамильтон встретился тут с представлениями корпускулярной теории, по которой определение траектории светового луча является специальным случаем механической задачи о движении материальной точки". В курсе лекций, прочитанных в 1891 году в Геттингене, Клейн вывел всю теорию Гамильтона-Якоби из системы квазиоптических представлений. Спустя десять лет, он с горечью отмечает, что эти идеи, изложенные им на съезде естествоиспытателей в Галле "не встретили того общего признания, на которое я рассчитывал". Несмотря на огромный авторитет Клейна, ему не удалось пробудить к этим идеям интерес ни у одного математика или физика того времени.

В чем же была причина бесплодия этой, безусловно, очень красивой идеи, захватившей таких людей, как Гамильтон и Клейн?

Ответ состоит в том, что оптико-механическая аналогия Гамильтона и Клейна оставалась чисто формальным приемом преобразования одного математического уравнения в другое. Она ничем не могла помочь в предсказании или объяснении каких-либо новых эффектов или явлений, так как для этого ей не хватало животворного физического принципа. А между тем, по иронии судьбы, тот самый год, когда разочаровавшийся Феликс Клейн навсегда оставляет попытки дальнейшего развития оптико-механической аналогии, был годом рождения "кванта действия", которому и было суждено оплодотворить до поры до времени формалистическую оптико-механическую схему. Возникновение квантовой эры в физике совпало с началом XX века и неразрывно связано с именем Макса Планка. Для объяснения распределения энергии в спектре черного излучения Планк вынужден был ввести в термодинамику совершенно новую величину — "квант действия", или, как ее теперь называют, постоянную Планка h. При этом Планк использовал гипотезу о том, что электроны могут поглощать или испускать энергию только в виде дискретных количеств /квантов/. Идея дискретности была настолько "ни на что не похожа", настолько чужда всем представлениям классической физики, что даже сам Планк первые годы склонен был придавать гипотезе квантов частный, ограниченный характер. Своей гипотезой Планк поставил "запретный" для физиков XIX века вопрос о структуре "источников и стоков" электромагнитного поля. Само электромагнитное поле оставалось для Планка непрерывным, классическим. Дальнейший шаг в развитии квантовой теории сделал Эйнштейн, введя понятие о "квантах света", фотонах. Имевшая при рождении только чисто термодинамический смысл, постоянная Планка в работе Эйнштейна получает право гражданства в оптике. Третьим шагом на пути триумфального шествия квантовой постоянной явилось ее включение Бором в последнее прибежище классической физики -- формулы классической механики. "Кванты, как масляное пятно, быстро пропитали собой все области физики" - писал де-Бройль.

Если изобразить схему развития физических идей, приведших к созданию квантовой механики, то она будет выглядеть так:



У истоков стоит Ньютон. Ньютоновская механика перевоплотилась в оптико-механической аналогии, а квантовый путь был возрождением на новом уровне старой корпускулярной теории света Ньютона, уже почти позабытой после триумфальных достижений в XIX веке волновой теории света. Проставленные на схеме годы рождения предтечей и первооткрывателей квантовой механики позволяют почувствовать убыстряющуюся поступь познания природы. Квантовая механика явилась результатом заключительного акта синтеза оптико-механической аналогии и квантового пути. Этот акт длился, если считать по датам получения статей редакциями журналов, менее восьми месяцев -- с июля 1925 года /первая "гельголандская" работа Гейзенберга/ по март 1926 года /доказательства Шредингером эквивалентности волнового и матричного формализма/.

При изложении истории открытия квантовой механики естественно возникает вопрос от отборе имен тех людей, которых можно назвать первооткрывателями. В моем представлении ряд первооткрывателей содержит пять имен: Гейзенберг, Борн, Паули, де-Бройль, Шредингер. Читателя может удивить, что в этом ряду отсутствуют имена двух гигантов — Дирака и Ферми. Это, однако, представляется логичным, поскольку речь идет об историческом аспекте, а не об известной классификации физиков по ландауским классам. Первооткрыватели были первыми архитекторами и строителями здания квантовой механики. Вклад Дирака и Ферми в строительство следующих этапов общеизвестен и его трудно переоценить, но они пришли в науку несколько позднее.

Пятидесятилетний юбилей матричной механики невольно будит воспоминания о другом пятилетнем юбилее, свидетелем которого мне довелось быть в Геттингене, куда я попал вскоре после великого гносеологического взрыва, каким явилась эпоха создания квантовой механики. Там можно было тогда встретить множество людей самых разных вкусов и способностей, жаждущих принять участие в становлении новой науки. Вокруг велись бесконечные разговоры, дискуссии, споры. Многие их участников этих дискуссий стали впоследствии знаменитыми учеными, нобелевскими лауретами, а сама эпоха уже стала достоянием истории. Я ни в коей мере не ставил своей задачей написать строго научную историю создания матричной механики, что было бы под силу разве что высококвалифицированному коллективу историков науки, а стремился передать только колорит той славной эпохи "бури и натиска". В качестве эпиграфа к своей книге "Der Teil und das Ganze" /"Часть и целое"/, являющейся летописью этой героической эпохи, Вернер Гейзенберг выбрал слова древнегреческого историка Фукидида: "Что касается разговоров, которые тогда велись, то мне, как их непосредственному участнику, оказалось невозможным сохранить в памяти

точное значение всего сказанного. Поэтому я заставил отдельных людей говорить так, как, по моему разумению, они могли бы говорить при соответствующих условиях. При этом я, насколько это было возможно, старался точно следовать ходу мысли говорящих". При изложении истории возникновения матричной механики я не стремился воспроизвести все изгибы мысли первооткрывателей, что, в сущности, сделать невозможно, а старался следовать логике их рассуждений и той "внутренней правде", которую имел в виду Фукидид. Оправданием неизбежных на таком пути неточностей могут быть эти слова Фукидида.

У многих читателей, возможно, возникнет желание узнать о становлении квантовой механики более подробно, чем это сделано здесь. Было бы очень желательно издать сборник работ первооткрывателей квантовой механики, снабжённый соответствующими комментариями. Тогда любой студент сможет с ними ознакомиться, а не смотреть на них как на окаменелые реликты минувшей эпохи. Это поможет избежать очень распространённой сейчас тенденции пренебрегать историческими корнями квантовой механики, строя её в строго аксиоматической форме.

"Несомненно"— писал Макс Борн об опасности этой тенденции,— такая методика быстро подводит к современным проблемам и очень удобна для подготовки специалистов, способных на практике применять то, чему их научили, однако я сомневаюсь, пригодна ли она для тех, кому предстоит заниматься оригинальными исследованиями, поскольку она не показывает, каким образом находит первооткрыватель свою собственную дорогу в джунглях неупорядоченных фактов и малопонятных теоретических попытках их объяснения".

2. Модель атома Бора.

Перейдём теперь к истории создания квантовой теории, т.е. вернёмся на квантовый путь. Важной вехой на этом пути являлась резерфордовская планетарная модель атома, возникшая, как прямой результат его экспериментов по рассеянию α-частиц. Эта модель была достаточна для объяснения экспериментов с α-частицами, но абсолютно не могла ничего дать для объяснения закономерностей спектральных линий атомов. Главная же беда состояла в том, что неустойчивость резарфордовой модели буквально "вопиет к небесам", так как по законам классической электродинамики вращающиеся электроны должны были бы через ничтожно малый промежуток времени истратить всю свою энергию на излучение и упасть на ядро. Чтобы выпустить в свет детище с таким незаурядным дефектом, нужна была незаурядная смелость, которой Резерфорд обладал с избытком. Модель Резерфорда жила, не имея, казалось бы, на это никакого права. "Вид на жительство" выдал ей Нильс Бор. Руководящей идеей Бора была идея о неприменимости классической электродинамики для описания поведения систем атомных размеров. "Что касается законов движения электронов, то представляется необходимым ввести в эти законы чуждую классической электродинамике величину, а именно постоянную Планка",- писал Бор во введении к своей работе "О строении атомов и молекул", опубликованной в 1913 году. Далее Бор формулирует свои знаменитые постулаты.

"1. Динамическое равновесие системы в стационарных состояниях можно рассматривать с помощью обычной механики, тогда как переход системы из одного стационарного состояния в другое нельзя трактовать на этой основе.

2. Указанный переход сопровождается испусканием монохроматического излучения, для которого соотношение между частотой и количечеством выделенной энергии именно такое, которое даёт теория Планка".

В таком виде постулаты Бора выглядят как бы уже специально приготовленными для построения формального аппарата матричной меха-

ники. Затем Бор, сначала в весьма осторожной форме, предлагает "простую интерпретацию расчётов... с помощью понятий обычной механики", вводя "условия квантования момента импульса", движущегося по круговой орбите электрона

$$mvr = n\hbar$$

Приравняв действующую на электрон центростремительную силу силе притяжения со стороны ядра

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

Бор получил выражение для механической частоты Ω_n обращения электрона по n-ой орбите

$$\Omega_n = \frac{me^4}{\hbar^3} \cdot \frac{1}{n^3}$$

и формулу для полной энергии электрона по такой орбите

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Частота излучения, сопровождающего переход атома из состояния m в состояние n, определяется по формуле

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} = \frac{me^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right),$$

которая совпадает с формулой спектральных линий атома водорода. Связь между наблюдаемыми оптическими и вычисленными механическими частотами дается принципом соответствия Бора, который гласит, что по мере увеличения n расстояние между отдельными уровнями уменьшается и движение электрона должно всё лучше описываться законами классической механики. Действительно, при $m = n+1$ получаем в пределе $n \to \infty$

$$\omega_{mn} \to \frac{me^4}{\hbar^3} \cdot \frac{1}{n^3} = \Omega_n$$

т.е. именно ту частоту, которую должен по законам классической электродинамики излучать движущийся по круговой орбите электрон. Интересно, что уже в первой работе Бор подчеркивает "первородство" оптических частот по сравнению с механическими. Эта мысль станет потом руководящей идеей при создании Гейзенбергом матричной механики.

Вскоре идеи Бора о наличии в атоме стационарных энергетических состояний получили прямое экспериментальное подтверждение в опытах Франка и Герца. Исследуя возбуждение спектральных линий атомов при облучении их электронами, Франк и Герц обнаружили, что переход энергии от электрона к атомам происходит лишь определенными дискретными порциями, зависящими от природы атома. Возбужденный атом излучает затем световой квант энергии $\hbar\omega$, равный потерянной электронами энергии. Это был первый прямой метод измерения планковской постоянной.

Оценивая величие боровской идеи о включении квантовой постоянной в классическую механику, Планк отметил, что смелость теории Бора и полнота его разрыва с укрепившимися воззрениями не имеют себе равных в истории физической науки. "В кванте действия этой теории суждено было найти долго искавшийся ключ к воротам в чудесную страну спектроскопии, которые со времени открытия спектрального анализа упорно не поддавались всем попыткам отворить их" -, писал Планк. Большим достижением боровской теории было объяснение тонкой структуры спектра атома водорода, эффекта Штарка и Зеемана. Однако со временем ограниченность любых наглядных модельных представлений становилась все более очевидной. Модели, которые приходилось строить для объяснения экспериментальных данных, становились все более сложными и искусственными, согласие же с экспериментом получалось в лучшем случае качественное.

Не останавливаясь подробно на этом периоде междуцарствия - периоде между созданием модели атома Бора и возникновением квантовой механики, приведём для характеристики сложившейся ситуации следующие слова Гейзенберга:"В дискуссиях, которые разгорелись... между мной и Паули, уже в октябре 1923 года, было зафиксировано следующее положение:"Модельные представления имеют только символический смысл, они являются классическими аналогами "дискретной" квантовой теории". Стало ясно, что дальнейшее развитие квантовой теории без адекватного математического аппарата невозможно. Заслуга построения такого аппарата принадлежит Гейзенбергу и Борну. Оказалось, что математический аппарат матричной механики является развитием и обобщением хорошо известного аппарата теории рядов Фурье. Приведём здесь некоторые факты этой теории в несколько непривычной, но в наиболее удобной для понимания дальнейшего форме.

3. Схемы Фурье.

Механическая схема задаётся гамильтонианом $E(p_i,q_i)$, являющимся функцией обобщенных координат q_i и обобщенных импульсов p_i. Уравнения движения имеют вид

$$\dot{q}_i = \frac{\partial E}{\partial p_i} \; ; \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial E}{\partial q_i} \qquad /1/$$

Рассмотрим весьма специальную систему, у которой p и q оказываются периодическими функциями времени, а траектории в фазовом пространстве суть замкнутые кривые.ж/ В этом случае мы можем раз-

---

ж/ В трёхмерном случае кулоновский потенциал и потенциал гармонического осциллятора являются единственными сферически-симметричными потенциалами, для которых орбиты суть замкнутые кривые /теорема Бертрана/.

ложить q и p в ряд Фурье

$$q_i(t) = \sum_{(\tau)} q_\tau^{(i)} e^{i\tau\omega t}, \quad p_i(t) = \sum_{(\tau)} p_\tau^{(i)} e^{i\tau\omega t}$$

и вместо функций от времени $q_i(t)$ и $p_i(t)$ оперировать с соответствующими наборами Фурье-компонент $q_\tau^{(i)}$ и $p_\tau^{(i)}$.

Всякую периодическую вещественную функцию $\Phi(t+T) = \Phi(t)$ с периодом T можно разложить в ряд

$$\Phi(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{in\Omega t} \qquad /2/$$

$$\Omega = \frac{2\pi}{T}, \qquad A_n^* = A_{-n}$$

Последовательность эквидистантных Фурье-частот

$$\ldots, -2\Omega, -\Omega, 0, \Omega, 2\Omega \ldots \qquad /3/$$

и последовательность комплексных Фурье-амплитуд

$$\ldots A_{-2}, A_{-1}, A_0, A_1, A_2 \ldots \qquad /4/$$

совместно однозначно задают периодическую функцию $\Phi(t)$.

Введём следующие обозначения. Совокупность частот Фурье /тон и обертоны/ назовём <u>схемой частот Фурье</u>.

$$\{\Omega_n\} = \{n\Omega\} \quad -\infty < n < \infty \qquad /5/$$

а совокупность амплитуд <u>схемой амплитуд Фурье</u>.

$$\{A_n\} \qquad -\infty < n < \infty \qquad /6/$$

Эквивалентную этим двум схемам совокупность /не сумму!/ слагаемых $A_n e^{in\Omega t}$ в ряде Фурье назовём <u>схемой элементов Фурье</u>.

$$\{A_n e^{in\Omega t}\} \qquad -\infty < n < \infty \qquad /7/$$

Схема элементов Фурье является "представителем" своей периодической функции и наоборот.

<u>Закон умножения схем элементов Фурье.</u>

Закон умножения схем элементов Фурье $\{A_\sigma e^{i\sigma\Omega t}\}$ и $\{B_\tau e^{i\tau\Omega t}\}$ определим из следующих соображений. Потребуем, чтобы произведение таких схем по-прежнему оставалось схемой элементов Фурье вида $C_\lambda e^{i\lambda\Omega t}$ /что, очевидно, соответствует периодичности произведения двух периодических функций/. При перемножении таких двух схем возникает совокупность элементов Фурье вида $A_\sigma B_\tau e^{i(\sigma+\tau)\Omega t}$ или, обозначив $\sigma+\tau=\lambda$, получаем $A_{\lambda-\tau} B_\tau e^{i\lambda\Omega t}$, $-\infty < \lambda < \infty$.

Мы требуем, чтобы получившаяся совокупность элементов снова образовывала схему элементов Фурье. Это означает, что все элементы совокупности с различными τ, но одинаковым λ входят в один и тот же элемент $C_\lambda e^{i\lambda\Omega t}$ новой схемы Фурье, поскольку осциллируют с одинаковой частотой. Таким образом, элемент новой схемы Фурье имеет вид $\sum_{(\tau)} A_{\lambda-\tau} B_\tau e^{i\lambda\Omega t}$, т.е.

$$C_\lambda = \sum_{(\tau)} A_{\lambda-\tau} B_\tau \qquad /8/$$

Переобозначая индекс суммирования, получаем

$$C_\lambda = \sum_{(\sigma)} B_\sigma A_{\lambda-\sigma} = \sum_{(\tau)} B_{\lambda-\tau} A_\tau$$

т.е. произведение двух схем элементов Фурье не зависит от порядка сомножителей.

<u>Правило дифференцирования</u> схемы элементов Фурье заключается в дифференцировании каждого элемента схемы

$$\frac{d}{dt}\{A_n e^{in\Omega t}\} = \{i\Omega n A_n e^{in\Omega t}\} \qquad /9/$$

Очевидно, что постоянной величине A. соответствует схема элементов Фурье вида

$$\{0\,0 \ldots A \ldots 0\,0\}$$

Мы изложили здесь общеизвестные факты из теории рядов Фурье в такой форме, чтобы их связь с излагаемыми далее схемами Гейзенберга предстала в наиболее выпуклом виде.

4. Схемы Гейзенберга

Гейзенберг поставил перед собой задачу построить, как говорили тогда в Геттингене, механику оптических частот, призванную заменить собой классическую механику. Спектральные линии атомов /"оптические частоты"/ не имели ничего общего со схемой частот Фурье с основным тоном и кратными обертонами. Согласно замеченному Ритцем эмпирическому правилу, оптические частоты ω_{nm} выражались с помощью ряда "термов" T_1, T_2, ... по формуле

$$\omega_{nm} = T_n - T_m \qquad /10/$$

Отсюда следует комбинационный принцип для частот: $\omega_{nk} + \omega_{km} = \omega_{nm}$

Таким образом, оптические частоты содержали не один, а два "говорящих" индекса, и спектроскописты обычно располагали результаты своих измерений в виде квадратной таблицы

$$\begin{pmatrix} 0 & \omega_{12} & \omega_{13} & \cdot \\ \omega_{12} & 0 & \omega_{23} & \cdot \\ \omega_{31} & \omega_{32} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \end{pmatrix} \qquad /11/$$

"Кажется странным, - писал впоследствии Борн, - что это никогда не внушало математически образованным физикам идею о матрицах".

Назовем такую таблицу схемой частот Гейзенберга

$$\{\omega_{nm}\} \qquad 0 < n, m < \infty$$

Эта схема заменяет схему частот Фурье в классической механике. Аналогичным образом расположенную совокупность амплитуд

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \ldots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ldots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \ldots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \qquad /12/$$

назовем схемой амплитуд Гейзенберга:

$$\{a_{nm}\} \qquad 0 < n, m < \infty$$

И, наконец, эквивалентную этим двум схемам схему элементов $a_{nm} e^{i\omega_{nm}t}$ назовем схемой элементов Гейзенберга

$$\{a_{nm} e^{i\omega_{nm}t}\}$$

Схема элементов Гейзенберга является "полномочным представителем" рассматриваемой квантовой системы /например, атома/.

Закон умножения схем элементов Гейзенберга.

Продолжая, насколько будет возможно, аналогию с теорией рядов Фурье, потребуем, чтобы произведение двух схем $\{a_{\sigma\delta} e^{i\omega_{\sigma\delta}t}\}$ и $\{b_{\tau\gamma} e^{i\omega_{\tau\gamma}t}\}$ элементов Гейзенберга оставалось схемой элементов Гейзенберга вида $c_{\lambda\mu} e^{i\omega_{\lambda\mu}t}$ с тем же спектром частот. При перемножении таких двух схем возникает совокупность элементов Гейзенберга вида $a_{\sigma\delta} b_{\tau\gamma} e^{i(\omega_{\sigma\delta}+\omega_{\tau\gamma})t}$. Единственная возможность сохранить у этой совокупности элементов прежний спектр частот состоит в том, чтобы заставить "молчать" два индекса, т.е. положить $\delta = \tau$ /альтернативную возможность $\sigma = \gamma$ рассмотрим чуть позже/. Тогда, согласно комбинационному принципу частот, получаем совокупность элементов $a_{\sigma\delta} b_{\delta\gamma} e^{i\omega_{\sigma\gamma} t}$. И снова, поскольку в результате должна получиться схема элементов Гейзенберга, все элементы совокупности с различными δ мы должны объединить в один элемент Гейзенберга $C_{\sigma\gamma} e^{i\omega_{\sigma\gamma} t}$. Таким образом, элемент новой схемы Гейзенберга имеет /после переобозначения индексов/ вид $\sum_\delta a_{\sigma\delta} b_{\delta\gamma} e^{i\omega_{\sigma\gamma} t}$, т.е.

$$C_{\sigma\gamma} = \sum_\delta a_{\sigma\delta} b_{\delta\gamma} \qquad /I3/$$

Возвращаясь к альтернативной возможности $\sigma = \gamma$, нетрудно, проведя в точности те же выкладки, получить формулу

$$C_{\sigma\gamma} = \sum_\delta b_{\sigma\delta} a_{\delta\gamma} \qquad /I4/$$

Закон умножения схем элементов Гейзенберга оказался зависящим от порядка сомножителей. Некоммутативность его схем чуть было не поставила Гейзенберга втупик. "Я имел счастливый случай признать символическое умножение Гейзенберга... в качестве примера хорошо известного матричного исчисления и быть первым, насколько я знаю, кто написал такое странное уравнение перестановок координаты и импульса," - писал Борн.

Правило дифференцирования схем элементов Гейзенберга заключается в дифференцировании каждого элемента схемы

$$\frac{d}{dt}\left\{a_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\right\} = \left\{i\omega_{nm} a_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\right\} \qquad /I5/$$

Согласно Бору, $\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m)$. Считая E_n и E_m диагональными элементами матрицы энергии $E_{\sigma\tau}$ /недиагональные элементы равны нулю/, это уравнение можно записать в форме

$$\frac{d}{dt}\left\{a_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\right\} = \left\{\frac{i}{\hbar}\sum_\sigma \left(E_{n\sigma} a_{\sigma m} e^{i\omega_{\sigma m} t} - a_{n\sigma} e^{i\omega_{n\sigma} t}\right)\right\} \qquad /I6/$$

В матричной форме уравнение принимает вид

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar}(EA - AE) \qquad /I7/$$

Это коммутационное соотношение явилось фактически центральным пунктом рассуждений Гейзенберга, хотя в его первой работе оно еще отсутствует. В этой работе Гейзенберга коммутационные соотношения содержались только в скрытой форме / в виде правила сумм для сил осцилляторов/. "Странное" коммутационное уравнение, о котором упоминал Борн, было получено им для частицы в произвольном потенциальном поле $V(q)$ следующим образом. Полная энергия частицы $E = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q)$. Из выражения Гейзенберга для временной производной любой физической величины имеем

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar}(Eq - qE) = \frac{im}{2\hbar}(\dot{q}^2 q - q\dot{q}^2) = \frac{im}{2\hbar}\left[\dot{q}(\dot{q}q - q\dot{q}) + (\dot{q}q - q\dot{q})\dot{q}\right]$$

Отсюда $\dot{q}q - q\dot{q} = \hbar/im$. Подставляя $p = m\dot{q}$, получаем, окончательно, знаменитое соотношение перестановок Борна

$$qp - pq = i\hbar \qquad /I8/$$

5. Линейный гармонический осциллятор

Вся матричная механика была вызвана к жизни стремлением постигнуть тайнопись атомных спектров. Математические схемы Гейзенберга создавались "в надежде просто угадать, в конце концов, правильные квантовотеоретические формулы для интенсивностей" спектральных линий водорода. Трудности оказались, однако, слишком велики. "Поэтому я стал искать механическую систему, допускавшую более простое математическое описание, для которого я мог бы довести до конца свои расчеты", - писал Гейзенберг. Такой подходящей механической системой оказался для Гейзенберга осциллятор. В качестве модели Гейзенберг рассмотрел ангармонический осциллятор, так как особенности его подхода наиболее рельефно выступали для систем с неэквидистантным спектром частот. Приведем здесь для иллюстрации расчеты Гейзенберга для линейного гармонического осциллятора. Энергия классического гармонического осциллятора имеет вид

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k q^2 \qquad /19/$$

и уравнение движения

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = 0, \qquad \omega_0^2 = k/m \qquad /20/$$

Переход к квантовому языку состоит в том, что p и q следует заменить бесконечными матрицами, элементы которых p_{nm} и q_{nm} соответствуют переходам осциллятора из состояния с энергией E_m в состояние с энергией E_n. Для матриц выполняется квантовое условие перестановок Борна $qp - pq = i\hbar$. Уравнению движения должен удовлетворять каждый элемент q_{nm} матрицы q

$$q_{nm} + \omega_0^2 q_{nm} = 0 \qquad /21/$$

так что $q_{nm} = q_{nm}^{(0)} e^{i\omega_{nm} t}$. Отсюда следует

$$(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2)\, q_{nm} = 0 \qquad /22/$$

Все элементы q_{nm}, за исключением тех, которым соответствуют $\omega_{nm} = \pm \omega_0$, равны нулю. Поскольку нумерация матричных элементов произвольна, мы можем потребовать, чтобы в нуль обращались все матричные элементы q_{nm}, кроме матричных элементов, соответствующих переходам между соседними квантовыми состояниями. Эти переходы отвечают, очевидно, поглощению или испусканию кванта. Таким образом,

$$q_{nm} = 0 \quad \text{при } m \neq n \pm 1 \qquad /23/$$
$$q_{nm} \neq 0 \quad \text{при } m = n \pm 1$$

Примем $\omega_{n,n+1} = +\omega_0$, $\omega_{n,n-1} = -\omega_0$. Предположим существование у осциллятора основного состояния с наименьшей энергией E_0. Тогда матрица q_{nm} будет ограничена сверху и слева нулевой строкой и нулевым столбцом. В результате имеем

$$q = \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \cdots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \qquad /24/$$

Матрица импульса определяется из уравнения $p = m\dot{q}$ $/p_{nm} = im\omega_{nm} q_{nm}/$ и принятого условия на частоты ω_{nm}

$$p = im \begin{pmatrix} 0 & \omega_{01} q_{01} & 0 & 0 & \cdots \\ \omega_{10} q_{10} & 0 & \omega_{12} q_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & \omega_{21} q_{21} & 0 & \omega_{23} q_{23} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} = im\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \cdots \\ -q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \cdots \\ 0 & -q_{21} & 0 & q_{23} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \qquad /25/$$

Теперь мы можем вычислить матрицу энергии осциллятора $E = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega_0^2 q^2)$. С помощью выведенного Гейзенбергом правила умножения схем элементов находим

$$q^2=\begin{pmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & q_{01}q_{12} & \cdot \\ 0 & q_{01}q_{10}+q_{12}q_{21} & 0 & \cdot \\ q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12}+q_{32}q_{23} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \end{pmatrix};\ p^2=-m\omega_0^2\begin{pmatrix} -q_{01}q_{10} & 0 & q_{01}q_{12} \\ 0 & -q_{01}q_{10}-q_{12}q_{21} & 0 \\ q_{21}q_{10} & 0 & -q_{12}q_{21}-q_{23}q_{32} \end{pmatrix} \qquad /26/$$

Отсюда

$$E=m\omega_0^2\begin{pmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{01}q_{10}+q_{12}q_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_{12}q_{21}+q_{23}q_{32} & 0 \end{pmatrix} \qquad /27/$$

Матрица энергии оказывается диагональной, причем, как нетрудно видеть, в силу условия на частоты $\omega_{n,n\pm1}=\pm\omega_0$, ее элементы не зависят от времени. Это эквивалентно закону сохранения энергии, причем элементы E_{nn} главной диагонали представляют энергии соответствующих n-квантовых состояний. Остается найти их явный вид, что можно сделать с помощью соотношения перестановок. Действительно, вычисляя по правилу гейзенберговского умножения разность

$$qp-pq=2im\omega_0\begin{pmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 \\ 0 & q_{12}q_{21}-q_{01}q_{10} & 0 \\ 0 & 0 & q_{23}q_{32}-q_{12}q_{21} \end{pmatrix} \qquad /28/$$

мы должны приравнять ее произведению $i\hbar$ на единичную матрицу. Отсюда получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} q_{01}q_{10} &= \hbar/2m\omega_0 \\ q_{12}q_{21}-q_{01}q_{10} &= \hbar/2m\omega_0 \\ q_{23}q_{32}-q_{12}q_{21} &= \hbar/2m\omega_0 \end{aligned} \qquad /29/$$

Решение этой системы имеет вид

$$q_{n,n+1}\,q_{n+1,n}=(n+1)\frac{\hbar}{2m\omega_0} \qquad /30/$$

Подставляя его в матрицу энергии, определим общий вид диагонального члена

$$E_{nn}=m\omega_0^2\left(q_{n,n+1}\,q_{n+1,n}+q_{n,n-1}\,q_{n-1,n}\right)=\hbar\omega_0\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \qquad /31/$$

$$n=0,\ 1,\ 2\ \ldots$$

Спектр осциллятора оказался эквидистантным, причем низшее состояние / n = 0/ обладает конечной энергией, равной половине энергии кванта. Ее называют нулевой энергией осциллятора

6. Спектр атома водорода.

На примере осциллятора только что возникшая матричная механика доказала свою жизненность. Ее формальный аппарат принимает законченный математический вид. Однако "... я был тогда несколько удручен тем, что мне никак не удавалось вывести из новой теории простой спектр водорода", - писал впоследствии Гейзенберг. Решить эту задачу с помощью матричного аппарата удалось Паули. Это был его второй важный вклад в создание матричной механики. Другой, тоже чрезвычайно существенный, вклад Паули становится ясным при ознакомлении с перепиской Гейзенберга и Паули этого периода, которая опубликована еще не полностью.

Задача о движении электрона в кулоновском поле ядра эквивалентна хорошо известной кеплеровской задаче о движении планеты вокруг Солнца. В этой задаче сохраняются два вектора. Постоянство вектора момента количества движения $\vec{L}$ означает, что движение планеты проходит по плоской орбите. Другой вектор $\vec{A}$, который сейчас обычно называют вектором Рунге-Ленца, был известен еще Лапласу. Для электрона в поле протона $\vec{A} = \frac{1}{e^2 m}(\vec{L} \times \vec{P}) + \frac{\vec{z}}{z}$. Вектор $\vec{A}$ направлен по большой оси эллипса, т.е. отвечает фиксации этой оси в пространстве. Записав эти векторы в симметризованной эрмитовской форме, Паули ввел для них гейзенберговские матрицы L и A , выраженные через канонические матрицы q и p . Далее, с помощью борновского соотношения перестановок, он получил систему трех матричных уравнений для L , A и E , причем матрица координат оказалась исключенной. Перестановочные соотношения для матриц L и A приняли вид

$$[L_i L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k ; \; [L_i A_j] = i\varepsilon_{ijk} A_k ; \; [A_i A_j] = -2\frac{iE}{me^4}\varepsilon_{ijk} L_k \qquad /32/$$

$$(\hbar = 1)$$

Решив эти уравнения, Паули нашел энергетический спектр водорода, а из факта некоммутативности матриц L^2 и A сделал вывод, что спектр вырожден. Решение задачи о спектре атома водорода явилось для матричной механики большим успехом. "Едва ли нужно писать, как сильно я радуюсь новой теории водорода и насколько велико мое удивление, что Вы смогли так быстро ее разработать", - писал Гейзенберг Паули.

7. Разговор Гейзенберга с Эйнштейном

В работе Гейзенберга можно выделить две основные идеи. Во-первых, Гейзенберг постулировал, что уравнения движения классической механики справедливы и в атомной механике, но координате $X(t)$ следует придавать иной смысл. Это была исключительно важная гипотеза, поскольку к этому времени многие физики склонялись к мысли, что в атомной физике вся механика, а значит и уравнения движения, имеют

иной вид. Другая мысль Гейзенберга о замене классической координаты $X(t)$ набором квантовых элементов оказалась исключительно плодотворной. Гейзенберг пришел к этой мысли руководствуясь идеей о том, что в теории должны фигурировать только принципиально наблюдаемые величины /координату электрона в атоме он считал величиной принципиально ненаблюдаемой/. По этой причине в теории Гейзенберга фигурировали только наблюдаемые оптические частоты, а всякое упоминание о ненаблюдаемых механических частотах отсутствовало. Для понимания гейзенберговской идеологии чрезвычайно интересна его беседа с Эйнштейном, состоявшаяся весной 1926 года после доклада Гейзенберга на физическом коллеквиуме Берлинского университета. Изложение содержания беседы /в духе Фукидида/ Гейзенберг приводит в уже упоминавшейся книге "Часть и целое". Я позволю себе привести здесь довольно большую выдержку из этой беседы, так как она кажется мне чрезвычайно поучительной с эвристической точки зрения.

"То, что вы нам рассказали, звучит необычно. Вы предполагаете, что в атоме существуют электроны и в этом вы, вероятно, правы. Но орбиты электронов в атомах вы хотите отменить, хотя в камере Вильсона пути электронов отчетливо видны. Можете ли вы объяснить, почему Вы сделали столь забавное допущение?" Я ответил: "Пути электронов в атоме нельзя наблюдать, но по излучению, которое испускает атом, можно непосредственно судить о частотах и соответствующих амплитудах электронов в атоме. Знание всех частот и всех амплитуд в современной физике является некоторым эрзацем знаний об орбитах. Поскольку, однако, разумно иметь в теории только наблюдаемые величины, я счел разумным ввести совокупность амплитуд и соответствующих частот как представителей электронных орбит" - "Но Вы же не верите всерьез, что в физической теории можете использовать только непосредственно наблюдаемые величины?" "Я думал, - сказал я в изумлении, - что Вы положили эту мысль в основу вашей теории. Вы всегда подчеркивали, что мы не имеем права говорить об абсолютном времени, поскольку это абсолютное время нельзя наблюдать. Только показания часов, будь то в неподвижной или подвижной системе отсчета, могут быть использованы для определения времени", - "Возможно, что я использовал подобную философию, но она все же бессмысленна. Или, говоря осторожнее, имея в виду эвристический смысл познания, надо напоминать себе, что же на самом деле наблюдается. Но с принципиальной точки зрения совершенно неправильно пытаться построить теорию только на основании наблюдаемых величин. Дело обстоит как раз наоборот. Только теория определяет, что может быть наблюдено. Дело в том, что наблюдение, вообще, очень сложный процесс. Явление, которое должно быть наблюдено вызывает какие-то события в наших измерительных приборах. Как результат, в этих приборах происходят дальнейшие события, которые , в свою очередь, вызывают чувственные восприятия в нашем сознании Во время всего этого длинного пути - от явления до фиксации в нашем сознании - мы должны знать как природа функционирует, мы должны знать законы природы, если хотим утверждать, что мы что-то наблюдали. Только теория, т.е. знание законов природы, позволяет нам по чувственным впечатлениям судить о вызвавшем эти впечатления явлении. Если утверждается, что что-то может быть наблюдено, то следовало бы точнее сказать следующее: хотя мы берем на себя смелость формулировать новые законы природы, которые отличаются от известных до сих пор, то это значит, что мы предполагаем, что законы природы на пути от наблюдаемого явления до нашего сознания так точно функционируют, что мы можем им доверять, и поэтому имеем право вообще говорить о наблюдении...Ваши утверждения, что вы имеете дело только с наблюдаемыми величинами, на самом деле есть гипотеза о свойствах теории, которую вы пытаетесь сформулировать.

Вы предполагаете, что ваша теория оставляет описание процесса излучения в важных для вас пунктах нетронутой. Вы, может быть, и правы, но быть уверенным в этом нельзя".

Этот диалог может служить наглядной иллюстрацией высказывания /утверждения/ Бора об "обратимых истинах", которые верны как в прямом, так и в противоположном смысле.

ж ж ж

Квантовая механика была построена. Настало время решить конкретные задачи. Однако это оказалось далеко не тривиальным делом. Уже расчет спектра атома водорода был связан, как мы видели, со значительными трудностями. Особую проблему представляли системы с непрерывным спектром. Было не ясно, как решать задачи теории столкновений. Разрешить эти и другие затруднения удалось волновой механике Шредингера.

Первая статья Шредингера с решением задачи о спектре атома водорода поступила в редакцию 27 января 1926 года, через 10 дней после поступления в редакцию статьи Паули с решением этой же задачи матричным методом. В этой работе Шредингера была ссылка на единственную /если не считать двух ссылок формально-математического характера/ физическую работу. Это была работа де-Бройля. "Прежде всего нельзя не упомянуть, что основным исходным толчком, приведшим к появлению приведенных здесь рассуждений, была диссертация де-Бройля, содержащая много глубоких идей", - писал Шредингер. Гипотеза де-Бройля о двойственном, волновом и корпускулярном, характере материи вдохнула жизнь в формалистическую схему оптико-механической аналогии.

К моменту появления гипотезы де-Бройля идея Эйнштейна о дуалистической, волновой и корпускулярной, природе света так же, как и его формулы для световых квантов

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

получили всеобщее признание. "Попытаться приписать электрону, и вообще всем частицам, подобно фотонам, двойственную природу, наделить их волновыми и корпускулярными свойствами, связанными между собой квантом действия - такая задача представлялась крайне необходимой и плодотворной", - писал позднее де-Бройль о сложившейся к тому времени ситуации. По мнению де-Бройля формулы Эйнштейна для фотонов применимы для любой материи и служат словарем для перевода с языка волновой картины / $\vec{k}$, ω / на корпускулярный / $\vec{p}$, E / и обратно. "Необходимо создать новую механику волнового характера, которая будет относиться к старой механике как волновая оптика к геометрической оптике", - писал де-Бройль. Его идеи были все же настолько смутными, что если бы Эйнштейн не указал на них в своей статье, то они вряд ли привлекли бы внимание. Участники семинаров того времени вспоминают, что даже несмотря на рекомендацию Эйнштейна, реферирование работ де-Бройля вызвало всеобщее веселье аудитории. Единственным человеком, который отнесся к этим идеям серьезно и использовал для их реализации всю свою могучую технику физика-теоретика высочайшего класса, был Шредингер. Под его пером идеи де-Бройля заговорили чеканным, необычайной красоты и изящества - математическим языком. Результатом явилась волновая механика, которую Шредингер сформулировал в серии статей "Квантование как проблема собственных значений". Идея возврата от дискретных матричных величин к языку дифференциальных уравнений была неожиданной. Могло показаться, что Геттинген и Цюрих говорят на разных языках. И здесь Шредингер закладывает последний краеугольный камень в фундамент квантовой механики. Он доказывает эквивалентность двух ее столь

различных по виду формулировок -- волновой и матричной механики. Доказывает и, в отличие от Паули, который не счел нужным опубликовать полученный им аналогичный результат, публикует его.

Теория Шредингера была уже "готовой" для рассмотрения задач о непрерывном спектре, вопросов теории соударений и т.д. Множество физиков с огромным энтузиазмом принялось переписывать страницы классической физики новым для них квантовым языком. Матричная и волновая формулировки оказались равноправными разговорными диалектами новой науки -- квантовой механики. Тот факт, что квантовая механика родилась двуязычной, только пошел ей на пользу. Применение к конкретной задаче того или иного формализма стало вопросом удобства. Так, для рассмотрения процессов в непрерывном спектре больше подходил формализм Шредингера. С другой стороны, довольно сложный вначале для волновой механики вопрос о вероятности переходов между дискретными уровнями в формализме матричной механики выглядел очень простым.

Я хорошо помню как все геттингенские молодые физики с большим удовольствием читали появившуюся в "Naturwissenschaften" рецензию Паули на книгу Борна и Иордана "Элементарная квантовая механика", в которой авторы поставили своей целью изложить всю квантовую механику и ее следствия в матричной форме и, тем самым, как бы подчеркнуть, что если бы даже Шредингер не открыл волновой механики, то все равно все было бы сделано в Геттингене с помощью матричного аппарата.

У меня нет сейчас под рукой этой рецензии, поэтому цитирую ее по памяти. "Меня трудно упрекнуть в том, что я отрицательно отношусь к матричной схеме расчета спектра атома водорода, поскольку я сам применил ее впервые /правда еще до открытия волновой механики/. Я всё же думаю, что, по крайней мере, в задаче о спектре водорода нужно пользоваться тем, что придумал Шредингер". В этой же рецензии Паули писал, что, применительно к рецензируемой книге, слово "элементарная" нужно, вероятно, понимать в том смысле, что в ней не встречается знак производной. В заключение рецензии Паули отмечает и достоинства книги: "Печать и бумага в ней превосходны". В научном мире той славной эпохи обижаться на "крокодилизмы" было не принято. Я нарочно привел здесь рецензию Паули, чтобы показать, что настроение и взаимоотношения ученых тех дней не зависели от издержек полемических выражений. Спустя много лет в примечании к своему письму к Эйнштейну Борн писал о Паули: "Я знал еще с тех времен, когда он был моим ассистентом в Геттингене, что это гений, которого можно сравнить лишь с самим Эйнштейном".

Заключение

История создания квантовой механики показывает, что быстрое развитие науки происходит только там, где имеются сложившиеся научные школы во главе с общепризнанными руководителями, обладающими большим педагогическим талантом. Квантовая механика росла и развивалась в школах Бора и Борна. По сравнению с окружающими их молодыми людьми Бор и Борн были учеными старшего поколения. Несмотря на глубокое отличие друг от друга, они одинаково хорошо умели дружить со своими учениками, помогать им в трудных первых шагах и поддерживать в минуты упадка сил и веры в себя.

Вспоминая историю тех лет, нельзя не заметить, что вся квантовая теория при рождении и в первые годы своего существования "говорила" почти исключительно по-немецки. В те годы было немыслимо заниматься теоретической физикой без знания языка Планка, Эйнштейна, Гейзенберга и Шредингера. Этот факт представляется мне закономерным результатом трудов многих поколений немецких физиков, начиная с Бунзена и Кирхгофа. Период 20-х годов это "золотой век" немецкой физики. К сожалению, он был недолог. Не прошло и 10 лет как Давид Гильберт

с горечью констатировал: "Говорят, что немецкая математика и физика за последние годы пошла на убыль. Это чистая ложь. Они вообще перестали существовать у нас в Германии". В значительной степени это соответствовало действительности.

Литература

I. В.Гамильтон, Trans. R. Jr. Acad., 15, 63 (1828); 16, 4, 93 (1830); 17, I (1837).

2. Ф.Клейн, Ges. Abhand., 2, 60I (190I).
Z.f.M.und Ph. , 375, (190I).

3. М.Планк, Deutsch. Phys. Ges. Ver., 2,202, 237(190I).

4. А.Эйнштейн, Ann. d.Phys. , 20, I99 (1906).

5. Л.де Бройль, Comptes Rendus., I77, 507 (1923);
I79, 3 (1924).

6. В.Гейзенберг, Z. f. Ph., 33,879, (1925).

7. М.Борн, П.Иордан, Z. f. Ph. , 34, 858 (1925).

8. В.Гейзенберг, М.Борн, П.Иордан, Z. f. Ph.,: 35, 557(1926).

9. Э.Шредингер, Ann. d. Ph. , 79, 36I, 489, 734 (1926).

IO. В.Паули, Z . f. Ph. , 36, 336 (1926).

Работа поступила -I7 мая I976 г.

Ответственный за выпуск С.Г.ПОПОВ
Подписано к печати 26.У-I976г. МН 02800
Усл. I,7 печ.л., тираж 250 экз. Бесплатно.
Заказ № 47.

Отпечатано на ротапринте в ИЯФ СО АН СССР,мп