

Принцип аналогии Бора в теории квантов.

Ю. А. Крутков.

1. Когда Планк почти 21 год тому назад для получения формулы распределения энергии в спектре черного тела высказал свою гипотезу квантов, то ему не надо было нового предположения о частоте света, испускаемого его моделью материи. Эта модель была линейным вибратором; очевидно, что испускаемый ею свет имеет частоту, равную частоте собственных колебаний вибратора.

Свойства Планкова вибратора противоречили классической электродинамике, но все-же связь его с излучением мыслилась такой, как в старой „квазиупругой“ оптике. Так, напр., поляризация испускаемого вибратором света, очевидно, должна была определяться направлением (и характером) его колебаний.

Бор принял за модель испускающей материи модель атома Рёзерфорда, снабдив ее квантовыми свойствами. Планкова гипотеза квантов приобрела у него такой вид: атомная система принимает только определенный ряд состояний, коим соответствует разрывный ряд значений энергии; при всяком изменении энергии системы, включая сюда испускание и поглощение энергии, система переходит из одного из этих состояний в другое ¹⁾. Так как рассматриваемые системы отнюдь не совершают гармонического колебательного движения, то требуется еще одна гипотеза, а именно о частоте испускаемого моделью света. У Бора—это его второе правило: излучение, испускаемое (или поглощаемое) при переходе из одного состояния в другое, монохроматично с частотой ν , даваемой уравнением:

$$E' - E'' = h\nu, \quad \dots \quad (1)$$

где h — постоянная Планка, а E' , E'' — энергии двух состояний.

Сперва казалось, что это второе правило, быть может, должно быть заменено другим, но вывод спектральной формулы Планка, данный Эйнштейном ²⁾, показывает с большой убедительностью, что оно должно быть сохранено.

Очевидно, что из правила, определяющего частоту из баланса энергии, нельзя извлечь ничего относительно поляризации и интенсивности испускаемого света. Интенсивность должна зависеть от числа атомов, находящихся в данном состоянии, и от вероятности

¹⁾ N. Bohr. On the Quantum-Theory of Line-Spectra I. Acad. Copenhagen 8 série, t. IV, n° 1, fasc. 1 (1918).

²⁾ A. Einstein. Verh. d. D. phys. Ges. 18, p. 318, (1916).

перехода из этого состояния в данное другое. О поляризации нельзя сказать ничего.

В 1918 году Бор дал правило, которое до некоторой степени устраняет этот пробел ¹⁾.

2. Рассмотрим для простоты систему с одной степенью свободы. Если через q обозначить ее обобщенную координату, через p —соответствующий ей момент, то при некоторых общих предположениях о характере движения можем высказать гипотезу квантов для нашей системы так: система принимает ряд состояний, даваемых уравнением:

$$J = 2 \int p dq = nh, \quad (2)$$

где интеграл распространен на всю область изменения q , а n — целое число: 0, 1, 2, 3, ; J функция от энергии E рассматриваемого состояния; от E зависят пределы интеграла, а под интегралом — p ; на пределах подинтегральная функция исчезает, поэтому

$$\frac{\partial J}{\partial E} = 2 \int \frac{\partial p}{\partial E} dq;$$

но $\partial p / \partial E = 1/\dot{q}$; следовательно,

$$\frac{\partial J}{\partial E} = 2 \int \frac{1}{\dot{q}} dq = 2 \int dt = T,$$

где T —период движения. Обозначая через $\omega = \frac{1}{T}$ частоту движения, имеем

$$\frac{\partial E}{\partial J} = \omega \quad (3)$$

Рассматриваем переход между состояниями, даваемыми квантовыми числами n' и n'' . По второму правилу Бора имеем:

$$\nu = \frac{1}{h} (E' - E'').$$

Пусть теперь n' и n'' велики, а их разность $n' - n''$ мала по сравнению с n' и n'' .

Тогда, пользуясь (3), можем вместо $E' - E''$ (приближенно) написать $\omega (J' - J'')$.

$$\nu = \frac{\omega}{h} (J' - J'').$$

Но $J = n'h$ и $J'' = n''h$, следовательно

$$\nu = \omega (n' - n'') \quad (4)$$

Итак, при больших n' , n'' и малой разности $n' - n''$ система испускает согласно теории квантов частоту ω и ее обертоны.

Какие частоты испускает наша система по классической электродинамике?

¹⁾ N. Bohr l. c.

Проекцию ξ смещения системы на любое направление при тех предположениях о характере движения, о коих уже упоминалось, можно представить таким рядом Фурье ¹⁾:

$$\xi = \sum C_{\tau} \cos 2\pi (\tau \omega t + c_{\tau}). \quad \dots \dots (5)$$

Таким образом система испускает по классической электродинамике частоту ω и ее обертоны $\tau\omega$.

Сравнение этого результата и формулы (4), в которой мы разности $n' - n''$ даем разнообразные значения, показывает, что для больших квантовых чисел и малой их разности квантовая теория и классическая электродинамика дают для испускаемой частоты ν совпадающие результаты. Но следует помнить, что процессы, при коих происходит испускание, по двум теориям различны: согласно электродинамике, все $\tau\omega$ испускаются одновременно, по теории квантов каждому $(n' - n'')\omega$ соответствует свой переход из состояния n' в состояние n'' .

Согласно электродинамике коэффициенты („амплитуды“) C_{τ} в разложении (5) определяют интенсивность различных линий испускаемого спектра. Бор предполагает, что для больших n эти коэффициенты измеряют вероятность для перехода из состояния $n = n'$ в соседнее состояние $n = n'' = n' - \tau$ ($n' - n'' = \tau$); зная C_{τ} , можем заключать об интенсивности испускаемых линий.

Такое утверждение — можем называть его *принципом совпадения* — весьма естественно: для больших квантовых чисел все формулы теории квантов переходят в классические формулы.

Далее Бор предполагает, что и для *небольших* квантовых чисел знание „амплитуды“ C_{τ} в разложении (5), соответствующей частоте $\tau\omega$, позволяет оценить вероятность перехода, для коего $n' - n'' = \tau$. Так, например, если для всех движений некоторое C_{τ} равно нулю, то следует утверждать, что нет перехода $n' - n'' = \tau$. Это *принцип аналогии* Бора.

Для Планкова линейного вибратора разложение (5) сводится к одному члену $\tau = 1$. Отсюда заключаем, что для него $n' - n''$ всегда равно единице: испускаемая частота равна его частоте ω .

3. Переходим к системе с s степенями свободы. Если система принадлежит к так называемым „условно-периодическим“ ²⁾, то (при отсутствии так называемых „соизмеримостей“ между движениями) гипотеза квантов гласит:

$$J_k = 2 \int p_k dq_k = n_k h \quad (k = 1, 2, \dots, s) \quad \dots \dots (6)$$

Энергия E система функция всех J_k . Нетрудно показать, что вместо (3) будем теперь иметь формулы

$$\frac{\partial E}{\partial J_k} = \omega_k \quad (k = 1, 2, \dots, s), \quad \dots \dots (7)$$

¹⁾ См. *Charlier. Mechanik d. Himmels*, I.

²⁾ I. c.

где ω_k „средние частоты“ колебаний отдельных степеней свободы.

Для r имеем формулу (1). Положим снова, что все n'_k, n''_k велики и что разности $n'_k - n''_k$ малы по сравнению с этими числами. Тогда получаем, пользуясь (7):

$$r = \frac{1}{h} (E' - E'') = \frac{1}{h} \sum_{k=1}^s \omega_k (J'_k - J''_k) = \sum_{k=1}^s \omega_k (n'_k - n''_k) \dots (8)$$

Система испускает частоты ω_k , обертоны $(n'_k - n''_k) \omega_k$ и комбинационные тоны $(n'_1 - n''_1) \omega_1 + (n'_2 - n''_2) \omega_2 + \dots$

Какие частоты система испускает по электродинамике? Можно показать, что „координаты“ q_k, a , следовательно, и смещение ξ в любом направлении, представляются s -кратным рядом Фурье³⁾:

$$\xi = \sum \dots \sum C_{\tau_1 \dots \tau_s} \cos 2\pi [(\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_s \omega_s) t + c_{\tau_1 \dots \tau_s}]; \dots (9)$$

испускаемый спектр имеет частоты $\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_s \omega_s$.

Для больших квантовых чисел два спектра совпадают, для небольших они совершенно различны.

Коэффициенты $C_{\tau_1 \dots \tau_s}$ в разложении (9) определяют интенсивность и поляризацию света частоты $\tau_1 \omega_1 + \dots + \tau_s \omega_s$. Бор заключает, что в предельном случае больших n_k эти коэффициенты измеряют вероятности самопроизвольных переходов, для коих $n'_k - n''_k = \tau_k$, и далее переносит это правило и на случай конечных n_k .

На основании правила возможны разнообразные заключения. Напр., так как в разложении (9) τ принимают все значения от $-\infty$ до $+\infty$, то нужно допустить и такие переходы, при коих не все n_k убывают (в противность предположению Зоммерфельда), что подтверждается наблюдениями над явлением Штарка и над тонкой структурой водородных линий. Далее: если какой-либо коэффициент $C_{\tau_1 \dots \tau_s}$ равен нулю для всех движений системы и любого направления, то переход $n'_k - n''_k = \tau_k$ ($k=1, 2, \dots, s$) нужно считать невозможным. Если $C_{\tau_1 \dots \tau_s}$ равно нулю только для смещения в определенном направлении, то переход $n'_k - n''_k = \tau_k$ $k=1, 2, \dots, s$ дает излучение, поляризованное в плоскости, перпендикулярной к этому направлению.

4. Рассмотрим систему с тремя степенями свободы, для которой одна из „координат“ циклична. Пусть это, напр., угол. Тогда соответствующий момент количества движения — величина постоянная.

Берем за координаты этот угол ϑ , расстояние частицы от оси вращения ρ и z , отсчитываемое по оси вращения, т.е. цилиндрические координаты.

Тогда

$$\left. \begin{aligned} z &= \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} C_{\tau_1 \tau_2} \cos 2\pi \left[(\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2) t + c_{\tau_1 \tau_2} \right] \\ \rho &= \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{-\infty}^{+\infty} C'_{\tau_1 \tau_2} \cos 2\pi \left[(\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2) t + c'_{\tau_1 \tau_2} \right]; \end{aligned} \right\} \dots (10)$$

далее для ϑ легко получить

$$\pm \vartheta = 2\pi\omega_3 t + \sum \sum C''_{\tau_1 \tau_2} \cos 2\pi [(\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2) t + c''_{\tau_1 \tau_2}], \quad (10')$$

где ω_3 — средняя частота вращения вокруг оси. Вводя вместо ρ, ϑ прямоугольные координаты x, y , легко получаем:

$$\left. \begin{aligned} x &= \rho \cos \vartheta = \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\tau_1 \tau_2} D_{\tau_1 \tau_2} \cos 2\pi [(\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2 + \omega_3) t + \vartheta_{\tau_1 \tau_2}] \\ y &= \rho \sin \vartheta = \pm \sum_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\tau_1 \tau_2} D_{\tau_1 \tau_2} \sin 2\pi [(\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2 + \omega_3) t + \vartheta_{\tau_1 \tau_2}] \end{aligned} \right\} \quad (10'')$$

Мы видим, что согласно (10) и (10''), движение составлено из гармонических колебаний по оси z с частотами $|\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2|$ и из круговых движений перпендикулярно оси с частотами $|\tau_1 \omega_1 + \tau_2 \omega_2 + \omega_3|$; излучение будет иметь составляющие поляризованные линейно и циркулярно.

По принципу аналогии нужно заключить, что n_3 может или оставаться постоянным; тогда при изменении n_1, n_2 , на которое ограничений не налагается, излучение поляризовано линейно по оси z ; или n_3 изменяется на ± 1 , излучение поляризовано по кругу. Наблюдения над действием электрического и магнитного поля над атомом водорода эти заключения подтверждают. Заключение, что n_3 изменяется только на ± 1 , получает еще подтверждение из закона сохранения суммы механического и электромагнитного количеств движения ¹⁾.

Число примеров, выясняющих значение нового правила Бора, можно было бы и увеличить. Весьма замечательное применение к вопросу об интенсивностях спектральных линий водорода содержит мемуар Крамерса ²⁾; интенсивности линий ионизованного гелия (серия Фоулера) при явлении Штарка рассмотрел Эпштейн ³⁾. Правило Бора, оставаясь теоретически непонятным, дает превосходные совпадения с данными опыта.

¹⁾ См. N. Bohr l. c. и Rubinowicz. Phys. Zschr. 19, pp. 441, 465 (1918).

²⁾ H. A. Kramers. Intensities of Spectral Lines. Acad. Copenhagen. 8 série, t. III, n° 3 (1919).

³⁾ P. Epstein. Ann. d. Phys. (IV), Bd. 58 (1919), p. 553.