

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ¹⁾

Вернер Гейзенберг.

По нашему обычному „воззрению“, т.-е. на основе привычных пространственно-временных понятий, пространство и материя представляются, в конечном счете, непрерывными и принципиально делимыми на сколь угодно малые части, если только отвлечься от возможной технической невыполнимости подобного дробления. Но, в противоположность этому следствию нашего непосредственного воззрения, физические и химические опыты показали, что в явлениях, протекающих в очень малых пространствах и промежутках времени, важную роль играет некоторый типично прерывный элемент. Уже химические „кратные отношения“ заставляли предполагать атомистическую структуру материи; так называемые „флуктуации“ (броуновское движение, рассеяние света и т. д.) привели к представлению о том, что материя построена из корпускул определенной, конечной величины; в опытах с корпускулярными лучами (катодные лучи, α -, β -лучи) эти частицы, из которых построена материя, стали доступными прямому наблюдению. В силу такой непосредственной экспериментальной очевидности атомистических представлений естественно было приписать основным частицам материи, т.-е. в конечном счете положительному и отрицательному электронам, одинаковую степень реальности, как и предметам окружающего нас обихода. Эти частицы стали представлять себе в виде чрезвычайно малых тельц определенной (и всегда одной и той же) массы и заряда с неизвестным пока внутренним строением. Эти тельца движутся по некоторым подлежащим дальнейшему изучению законам в пространстве и времени в известном непрерывном пространственно-временном мире, соответствующем нашему воззрению. С течением времени такое представление оказалось неверным, чему не приходится удивляться, если учесть принципиальную невозможность наглядности у названного прерывного элемента. Электроны, или атомы не обладают той степенью непосредственной реальности, как предметы

¹⁾ Перевод доклада, читанного на 89 съезде немецких естествоиспытателей и врачей в Дюссельдорфе в 1926 г. (Die Naturwissenschaften, № 45, 1926.) *Прим. перев.*

ежедневного опыта. Исследование типа физической реальности, соответствующей атомам и электронам, и есть предмет атомной физики и вместе с тем „квантовой механики“ (кв. м.). Типичный элемент прерывности, о котором говорилось выше, выражается не только фактом атомного строения вещества, но и закономерностями строения атома. Из теории Бора, а экспериментально из опытов Франка и Герца с соударениями и опыта Штерна и Герлаха с молекулярным пучком, мы заключаем о существовании дискретных стационарных состояний атома. Процессы перехода от одного из таких состояний к другому приходится рассматривать как типически прерывные. Наконец, с таким прерывным элементом мы встречаемся в явлениях излучения. Впервые это найдено Планком на основании полученного им закона черного излучения. Эйнштейн показал, что явления флуктуаций приводят к представлению о „световых корпскулках“ с вполне определенной энергией и импульсом. Опыты с фотоэлектрическим эффектом, явление Комптона и, в особенности, опыт Гейгера-Боте с явлением Комптона совершенно ясно показывают плодотворность гипотезы световых квантов. Несмотря на это, в противоположность частицам материи, световым квантам никогда не приписывалась такая же степень реальности, как предметам окружающего мира. Такое представление привело бы к слишком большим противоречиям с испытанными законами классической оптики. Есть, однако, указания на то, в особенности это отмечено Эйнштейном, что, наоборот, электроны обладают той же степенью реальности, как и световые кванты. К этому вопросу мы вернемся позднее. Здесь важно было подчеркнуть, что исследование указанного типичного прерывного элемента и „степени его реальности“ и есть настоящая задача атомной физики и содержание всех соображений квантовой механики.

I. На основании опытов Ленарда и Резерфорда и больших успехов теории Бора можно было считать доказанным, что атомы построены из положительных и отрицательных электронов, как предполагается в этой теории. Но боровские основные постулаты квантовой теории означают одновременно окончательный разрыв с понятиями классической теории. Несмотря на это, естественно было попытаться использовать классические понятия и образы, поскольку это логически допустимо. Возникшая таким образом форма теории Бора, позволившая полностью, посредством принципа соответствия, качественно описать характер строения атомов до деталей включительно, оказалась неудовлетворительной для количественного описания атомных процессов. Обнаружились также большие логические затруднения в применениях этой формы теории к некоторым задачам (дисперсия, водородный атом в скрещенных полях). Подлинная причина этих затруднений заключалась в переносе классических по-

ятий и представлений, чуждых существу квантовых основных постулатов, на проблемы строения атома,— применение простых наглядных моделей и образов для толкования физических закономерностей, степень наглядности которых в действительности совсем не ясна.

Программа кв. м. должна была поэтому прежде всего заключаться в освобождении от наглядных образов и в установлении простых соотношений между экспериментально данными величинами вместо применявшихся до сих пор законов классической кинематики и механики. Прежняя теория соединяла преимущество непосредственной наглядности и применения испытанных физических принципов с тем недостатком, что оперировать приходилось с принципиально не поддающимися проверке отношениями, которые могли приводить к внутренним противоречиям. Новая теория, наоборот, вынуждена прежде всего совершенно отказаться от наглядности, но зато должна содержать только конкретные соотношения, доступные непосредственной экспериментальной проверке и свободные от опасности внутренних противоречий. Для достижения этой цели, разумеется, нужно было далеко отойти от классических представлений. Обратимся, например, к спектру водорода. Как известно, противоречие заключалось в том, что, согласно классической кинематике, спектр любого периодического движения частицы должен состоять из равноотстоящих линий. В действительности наблюдается линейный спектр с линиями, сгущающимися в конечной области. Несмотря на это, на основании принципа соответствия, мы говорим о периодическом движении электрона. Если вообще корпускулярное представление должно быть сохранено, то избежать затруднения можно только отказавшись приписывать электрону, или атому определенную точку в пространстве, как функцию времени. Для оправдания этого нужно предположить, что такая точка не может быть непосредственно наблюдаема. Такой отказ означает первое решающее ограничение при рассмотрении вопроса о реальности корпускул.

Вместо отброшенного понятия „места электрона“ кв. м. пытается ввести совокупность физически хорошо определенных величин, которые в классической теории математически эквивалентны месту электрона. В классической теории полное излучение электрона дается разложением движения электрона в ряд Фурье; это разложение и может рассматриваться как представление движения электрона. Частота, амплитуда и поляризация спектральной линии — во всяком случае хорошо определенные величины, доступные наблюдению. Поэтому в кв. м. совокупность величин излучения, доступных наблюдению и соответствующих классическому ряду Фурье, рассматривается, как эквивалент „места электрона“. Согласно основным постулатам теории квантов, излучение линии связано с переходом из одного стационарного состояния к другому. Поэтому каждая величина излучения сопод-

чинена двум термам, или состояниям. Вместо классических „координат электрона“ в кв. м. выступает следовательно двухмерная „таблица“ величин излучения, так называемая „матрица“.

Естественно было сделать и следующий шаг, т.-е. ввести такие таблицы конкретных наблюдаемых величин вместо понятий, заимствованных из классической теории и, возможно, непосредственно не наблюдаемых, каковы — импульс, энергия и пр. Например, общей энергии атома соответствует таблица значений энергии стационарных состояний атома. Названное предположение означает дальнейшее ограничение рассмотренного выше характера реальности атомов. С другой стороны, то же предположение позволило установить замечательную тесную связь кв. м. с теми прерывностями, которые содержатся в теории Бора. Прежде всего обнаружилось, что существование дискретных значений энергии столь же естественно для кв. м., как, положим, наличие дискретного ряда собственных колебаний мембраны в классической теории. Далее оказалось, что простые соотношения, получаемые, например, из соображений о частоте переходов или о средних значениях прерывных переменных величин во времени, вытекают как математический результат расчета с такими таблицами, составленными из величин излучения. Мне кажется, что в этом заключается одно из самых важных свойств кв. м. К сожалению, именно эта особенность кв. м. до сих пор мало исследована.

Для получения завершенной теории необходимо еще разыскать математические соотношения между указанными таблицами величин излучения, которые соответствовали бы таким же соотношениям классической механики. Оказалось, что эти соотношения с формальной стороны очень просты. На основе заключений по физической аналогии обнаружилось, что сложение и умножение этих таблиц должно производиться по известным правилам алгебры матриц. С чисто формальной стороны различие новой и старой теории заключалось прежде всего в неприменимости закона коммутативности при умножении. Гамильтоновы уравнения механики по форме полностью могут быть переписаны в новой теории. Благодаря неперемещаемости множителей при умножении нужно было разыскать еще некоторые правила перемещения, чтобы дать математической схеме теории завершенную форму. Эти правила соответствуют, в некотором смысле, квантовым условиям прежней теории и содержат постоянную Планка.

Таким образом математическая схема кв. м. полностью завершается. При детальном осуществлении ее, о чем я сейчас буду говорить, оказывается, что во многих отношениях кв. м. совершенно схожа с классической теорией. Законы сохранения энергии и импульса остаются, как и в классической теории. Можно развить теорию канонических преобразований и получить таким образом полную теорию возмущений, совершенно соответствующую методам астрономии. В этом

отношении кв. м. даже много проще, чем классическая механика. Ряды возмущения в задаче о многих телах связаны в классической теории с известными затруднениями сходимости. В кв. м. эти ряды, вообще говоря, сходятся и поэтому задача о многих телах не имеет принципиальных затруднений.

Итак кв. м., по крайней мере принципиально, соответствует в очень широких пределах нашим фактическим сведениям об атомах. Для макроскопических процессов кв. м. формально переходит в классическую механику, следовательно и характер реальности чрезвычайно близко подходит к нашему обычному воззрению. Для микроскопических процессов остаются только соотношения между наблюдаемыми, экспериментально данными величинами. Пока нельзя дать непосредственно наглядного толкования физическим процессам, лежащим в основе этого.

Для экспериментальной проверки теории имеется необычайно обширный материал: спектры всех элементов, измерения энергии и пр. Для сравнения теории с опытом требовалась сначала математическая разработка теории. Она выполнена тремя различными независимыми путями.

1. Борн-Иордан. Квантовые величины даются с самого начала в виде матриц, поэтому можно применять известные методы высшей алгебры. Решение квантовой проблемы сводится к проблеме характеристических чисел (Eigenwertproblem), именно к преобразованию главных осей в форме Эрмита. Таким образом разобраны: атом водорода, эффект Зеемана, эффект Штарка (Паули), интенсивности линий в зеемановском эффекте, мультиплеты и аномальный эффект Зеемана, вопрос о тонкой структуре спектральных линий, полосатые спектры (осциллятор и ротатор), теория дисперсии.

2. Дирак (Dirac). Разработана алгебра и анализ величин, для которых не выполняется закон коммутативности (q -числа) независимо от толкования этих величин как „матриц“. Исчисление разработано настолько, что можно найти простые способы расчета для механических задач, очень похожие на способы классической теории (введение переменных действия и угловых переменных, ряды Фурье; ср. также работы Лондона). Рассмотрены: атом водорода, формулы интенсивностей для мультиплетов, q -значения, релятивистская кв. м., эффект Комптона, обратный удар $\frac{h\nu}{c}$, дисперсия.

3. Шрёдингер. О физических основаниях теории Шрёдингера я буду говорить позднее, пока нужно указать на ее значение для математической разработки кв. м. По известным принципам высшей линейной алгебры и анализа, проблема характеристических чисел бесконечной квадратичной формы, как у Борна-Иордана, вообще говоря, эквивалентна аналитической проблеме характеристических

чисел, определяющейся линейным дифференциальным уравнением и предельными условиями. Когда удалось найти это линейное дифференциальное уравнение и эту проблему характеристических чисел, то математическая обработка квантовых проблем свелась к широко разработанным математическим методам. Это выполнено Шрёдингером, который подошел, однако, к такой математической схеме другим путем, чем здесь указанный, и путем независимым от прежних работ по кв. м. Рассмотрены: атом водорода (без тонкой структуры в магнитном поле), эффекты Штарка и Зеемана, полосатые спектры, дисперсия. Преимущество метода Шрёдингера состоит главным образом в том, что он позволяет просто определять вероятности переходов. В других математических методах это, вообще говоря, очень трудно. Рассмотрены: интенсивности компонентов эффекта Штарка для атома водорода, формулы интенсивностей для эффекта Зеемана, интенсивности в сериях Лаймэна и Бальмера (Паули).

II. Вернемся теперь от математической разработки теории снова к физическому значению ее формальной стороны, т.е. к разбору тех утверждений, которые можно сделать о реальности и законах корпускул. Де Бройль в своей теории подошел к этой задаче совсем с новой стороны. Из теории де Бройля возникли соображения Шрёдингера и применения статистики Бозе Эйнштейном. Ограничения, сделанные нами в части I относительно реальности корпускул, в особенности утверждение о невозможности приписать корпускуле определенное место в функции времени, определенную энергию и т. д., дают возможность предполагать, что реальность корпускул вещества во многом схожа с реальностью световых квантов. Явления интерференции и дифракции световых волн не позволяют приписать световым квантам определенного пути и положения. Аналогия корпускул вещества и световых квантов становится особенно ясной, если исследовать по законам кв. м. отражение материальной частицы, например, от дифракционной решетки. Иордан, основываясь на одном соображении Дюэна, недавно показал, что отражение материальных частиц от решетки по кв. м. должно происходить по совершенно определенным дискретным направлениям, так же как дифракция светового луча. Аналогии такого рода привели де Бройля задолго до возникновения кв. м. к следующему предположению¹⁾. В теории света в настоящее время существует примечательный дуализм; многие явления описываются волновой теорией, другие — теорией световых квантов, некоторые же — обеими теориями. Позволительно предположить дуализм такого же рода и у материальных частиц. На этом основании де Бройль приписал любой материальной частице волну определенной частоты. Эта частота, как и у световых квантов, определяется по

¹⁾ О теории де-Бройля см. Я. И. Френкель, УФН, 4, 1925.

энергии частицы из соотношения $E = h\nu$. По Эйнштейну, эти волны, так же как и световые, могут интерферировать. Следовательно поток электронов при отражении от решетки должен идти только по определенным дискретным направлениям. Как указывалось, такой же результат позднее был выведен из кв. м. Отсюда естественно предположить, что кв. м. и волны де Бройля находятся в тесной связи. Де Бройль уже показал, что можно получить боровские орбиты атома водорода, если наложить условие, что волны, соответствующие движению ядра вокруг электрона, являются однозначной функцией пространства. Подлинная связь теории де Бройля и кв. м. открыта Шрёдингером. Этот исследователь разработал дальше идеи де Бройля и Эйнштейна; он установил дифференциальное уравнение волн де Бройля и показал, что проблема характеристических чисел этого уравнения совпадает с проблемой характеристических чисел кв. м. При этом оказалось, однако, что в теории материи нельзя найти трехмерного волнового уравнения, как в теории света, так как скорость волн всегда зависит от наличия других частиц. Для задачи о движении f -частиц возможно установить волновое уравнение в координатном пространстве $3f$ измерений, которое вполне эквивалентно математической проблеме кв. м. До сих пор не удалось в общем случае найти прямую связь волн Шрёдингера в фазовом пространстве с волнами де Бройля в обычном пространстве, которые должны быть подобными световым волнам. Таким образом волны в q -пространстве имеют пока формальное значение. В свое время Гамильтон обнаружил большую формальную аналогию классической механики с геометрической оптикой в многомерных пространствах. Это обстоятельство послужило могущественным математическим методом решения классических проблем. Точно так же по Шрёдингеру имеется большое формальное сходство кв. м. с волновой оптикой в многомерных пространствах и получается могущественный математический метод решения проблем кв. м. В последнее время многократно (Шрёдингер, Фламм) высказывалось предположение, что на основании дифференциального уравнения Шрёдингера возможно чисто непрерывное описание квантовых данных примерно так же, как в классической теории, т.-е. что квантовая теория в форме, существовавшей доселе, иллюзорна. Для последовательного проведения такой точки зрения приходится, однако, оставить как раз основания теории де Бройля, а следовательно кв. м. и квантовой теории вообще. Таким образом, по моему мнению, неизбежно полное противоречие с опытом (закон черного излучения, теория дисперсии). Следовательно этот путь неприемлем. Действительная реальность волн де Бройля обнаруживается в указанных выше явлениях интерференции, которые ускользают от всякого толкования на основании классических понятий. Исключительное физическое значение результатов Шрёдингера заключается в том утвер-

ждении, что наглядная интерпретация формул кв. м. содержит типичные черты как корпускулярной, так и волновой теории.

III. Основываясь на статистике световых квантов Бозе, Эйнштейн предложил статистику частиц материи, выявляющую реальность волн де Бройля еще с одной стороны. Бозе показал, что можно получить статистику световых корпускул, совпадающую с опытом, если отказаться применять для определения „состояния“ положение частицы в фазовом пространстве; вместо этого „состояние“ по Бозе определяется числом одинаковых частиц, находящихся в определенной ячейке фазового пространства. Эта основная предпосылка Бозе, по-видимому, совершенно не согласующаяся с корпускулярной теорией, является во всяком случае примечательным ограничением реальности корпускул. Она ставится, однако, несколько понятной, если перейти от световых корпускул к „соответствующим“ им некоторым, пока неизвестным, образом световым волнам. Вместо „числа корпускул“ состояние тогда будет определяться „энергией собственного колебания“, что вполне согласуется с обычной статистикой. Эйнштейн перенес это основное предположение статистики Бозе непосредственно на статистику материальных частиц. С точки зрения волновой теории де Бройля такая статистика понятна. Для корпускулярной теории она значит, что, вообще говоря, невозможно проследить корпускулу на ее пути и отличить от других, т.-е. индивидуальность корпускулы может потеряться. Такое предположение совершенно согласуется с ограничениями таких понятий, как место электрона и пр., которые сделаны выше при выводе основ кв. м. Несмотря на это, сначала кв. м. оставалась несовместимой со статистикой Эйнштейна. Кв. м. рассчитывает по корпускулам, а у Шрёдингера по волнам в 3*f*-мерных пространствах, поэтому счет состояний, например, атома, дает сначала всегда результат соответствующий классической статистике.

Для разъяснения этого противоречия были детально исследованы задачи о многих телах, встречающиеся в атомных системах. Правда, здесь идет речь о механической проблеме, отличной от той, которая лежит в основе статистики Эйнштейна. Но можно было надеяться и здесь встретить существенные черты, отличающие статистику Эйнштейна от классической. Прежде всего оказалось (с указанной оговоркой), что экспериментально найденное число стационарных состояний в атомах с многими электронами определенно указывает в пользу редукции статистических весов в эйнштейновском смысле и не в пользу классической статистики.

Если бы классическая статистика была верной, то число стационарных состояний было бы во много раз больше наблюдаемого. Далее оказалось, что решение задачи о многих телах в кв. м. обнаруживает характерную неопределенность: общая система термов или спектр

термов в задаче распадается на различные частичные системы. Среди этих частичных систем есть одна, не содержащая никаких „эквивалентных орбит“. Она отличается от других систем тем, что от ее термов не может быть переходов к термам остальных частичных систем. Общая система термов, а равным образом и указанная частичная система может рассматриваться как полное квантовое решение задачи. Ибо на решение в кв. м. налагается только требование „замкнутости“ системы термов; в замкнутой системе возможны переходы только внутри системы. Если избрать, без какого-либо обоснования, указанную частичную систему в качестве окончательного квантового решения, то статистические веса редуцируются как раз в эйнштейновском смысле; с другой стороны, выполняется сам собою запрет эквивалентных орбит (Паули). На основании этих исследований нельзя решить, насколько необходимо запрет Паули связан обратно с модификацией статистики Эйнштейна. Наличие тесной связи со статистикой Эйнштейна явствует из того, что указанная редукция статистических весов возможна только при совершенном равенстве частиц в задаче о многих телах (для электронов такое равенство, разумеется, налицо). При ничтожных различиях частиц должны существовать переходы между названными выше частичными системами. Квантовым решением задачи будет тогда вся система термов, что соответствует классическому счету. Механическим основанием рассмотренного выше подразделения спектра термов на частичные системы, не комбинирующиеся друг с другом, служит характерное резонансное явление. Оно состоит в том, что во всех задачах о многих телах частицы, образующие систему, непрерывно меняются местами. Например, не имеет смысла различать внутренние и внешние электроны в атомах. Если, как указано выше, выбрать частичную систему в качестве квантового решения, то по ходу расчета это значит, что только симметричные функции электронов в атоме имеют физический смысл; нельзя говорить о движении одного электрона, или о матрице, представляющей это движение. Здесь новое ограничение в вопросе о реальности корпускул. В виде примера задачи о многих телах до сих пор исследованы спектры атомов с двумя электронами, т.-е. He и Li^+ ; результаты удовлетворительно согласуются с опытом.

Резюмируем коротко еще раз различные утверждения, которые можно сделать на основании изложенных соображений о типическом прерывном элементе в процессах, протекающих в малых пространствах и о степени их реальности.

1. На основании всех опытов с α и β -лучами, фотографий Вильсона, опытов с молекулярными лучами и пр. следует непосредственная экспериментальная очевидность корпускул вещества. Подобных же образом опыты с фотоэлектрическим эффектом, опыт Гейгера—Боте (ср. также новый опыт Боте и исследования Кирхнера)

обнаруживают непосредственно реальность световых квантов. Существование дискретных стационарных состояний в атомах обнаружено опытами Франка и Герца и опытами Штерна и Герлаха с молекулярным пучком.

2. Нет возможности приписать корпускуле определенное место в функции времени, но с ней может быть сопряжена совокупность величин излучения, соответствующая ряду Фурье в классической теории. Далее принципиально невозможно в ряду одинаковых корпускул отличить или идентифицировать какую-нибудь определенную корпускулу.

3. В наших наглядных толкованиях физических процессов и математических формулах имеется дуализм волновой и корпускулярной теорий. Дуализм этот такого рода, что многие явления естественнее всего описываются волновой теорией света, или материи, в особенности явления интерференции и диффракции. Другие явления можно истолковать только на основании корпускулярной теории.

Эти положения должны были в грубых контурах обрисовать современное положение нашего знания о типичном прерывном элементе, обнаруживающемся в процессах, протекающих в очень малых пространствах. Противоречия наглядных толкований различных явлений, имевшиеся в схемах, применявшихся доселе, совершенно неудовлетворительны. Для наглядной, свободной от противоречий интерпретации опыта, который сам по себе, конечно, свободен от противоречий, до сих пор недостает какой-то существенной черты в нашем представлении о строении материи.
