

ПРОБЛЕМА МНОГИХ ТЕЛ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В. А. Фок, Ленинград

1. В заслушанных нами докладах был затронут ряд основных вопросов современной квантовой механики. С. И. Вавилов говорил о квантах света, Д. С. Рождественский — о строении атома, И. Е. Тамм — о попытках построения теории атомного ядра.

Из того, что было здесь сказано, уже достаточно ясно, что каждая из современных физических теорий и, пожалуй, каждая теория вообще имеет свою ограниченную область применимости. Нам уже вполне известны законы, которые определяют, например, структуру электронной оболочки атома. Известны законы взаимодействия атомов между собой, законы образования молекул. Все эти законы известны нам в принципе, и трудности заключаются здесь только в выводе математических следствий из этих законов.

С другой стороны, законы, относящиеся к световым квантам и взаимодействию света с материей, известны нам с гораздо меньшей степенью достоверности.

Наконец, о законах, действующих внутри атомного ядра, мы можем только догадываться. Только сейчас накапливается тот экспериментальный материал, который позволит впоследствии эти законы формулировать.

Теория, о которой я хочу рассказать, — так называемая квантовая электродинамика — включает в себя законы взаимодействия заряженных материальных частиц, взаимодействия их между собой и с электромагнитным полем, т. е. со световыми квантами. Эта теория, разумеется, тоже имеет свою ограниченную область применимости. Она не претендует на универсальность. Область применимости этой теории прежде всего может быть охарактеризована тем, что в ее рамках мы вправе не обращать внимания на структуру отдельных частиц — электронов и ядер, — а можем рассматривать их как некоторые заряженные материальные точки. С другой стороны, применимость этой теории становится уже сомнительной в тех случаях, когда приходится иметь дело со световыми квантами, обладающими весьма большой энергией — порядка десятков миллионов вольт. Но, несмотря на эти ограничения, область применимости теории все-таки достаточно обширна. Эта теория охватывает собою, во-первых, всю обыкновенную квантовую механику, т. е. законы взаимодействия электронов и ядер в атомах и молекулах. Во-вторых, она дает законы излучения, т. е. взаимодействия заряженных

частиц со световыми квантами. Поскольку квантовая электродинамика дает взаимодействие между заряженными частицами, она позволяет также формулировать квантовую проблему многих тел, т. е. установить основные уравнения, которые служат для описания системы, состоящей из многих заряженных частиц. Но наряду с этой принципиальной частью — установлением основных уравнений — задача многих тел имеет и свою прикладную часть. В самом деле, для того, чтобы вывести какие-нибудь конкретные следствия из теории, недостаточно иметь систему уравнений, а нужно иметь также и методы фактического, хотя бы приближенного, их решения.

Мой доклад будет касаться и той и другой части проблемы многих тел. Я не буду пытаться дать обзор прежних исследований по этому вопросу — упомяну только, что основная часть была сделана Дираком, Гейзенбергом и Паули, — а буду опираться, главным образом, на свои собственные работы.

2. В классической электродинамике электромагнитное поле может быть описано посредством скалярного потенциала Φ и векторного потенциала A , представляющих некоторые функции от координат и времени. В качестве предварительного этапа, сохраним этот классический способ описания поля, а для материи будем пользоваться квантовым способом описания посредством волновой функции (которую принято обозначать буквой ψ). Физический смысл волновой функции состоит в том, что она представляет запись тех сведений о частице, или системе частиц, которые получаются в результате определенного опыта над ними. Знание волновой функции позволяет вычислить вероятность получить, при измерении величины, относящейся к данной системе, то или иное ее значение. Измеряемой величиной может быть, например, энергия или количество движения частицы.

Волновая функция зависит от переменных, которые соответствуют степеням свободы системы, и, кроме того, еще от времени. Зависимость волновой функции от времени имеет тот физический смысл, что она позволяет связать сведения, полученные в результате опыта, относившегося к определенному моменту времени, с распределением вероятностей для результатов последующих опытов.

Рассмотрим сперва одну материальную частицу, например электрон.

Степени свободы электрона соответствуют трем его координатам x , y , z , определяющим положение его в пространстве, и одной добавочной переменной, соответствующей как бы его ориентировке и принимающей только два значения. Эту добавочную переменную принято называть спином. Кроме спина, электрон имеет по теории Дирака еще одну степень свободы, не наблюдаемую на опыте непосредственно, но играющую большую роль в теории позитронов, т. е. частиц, подобных электрону, но с положительным зарядом. Эта новая степень свободы электрона соответствует возможному изменению знака его кинетической энергии.

В квантовой механике всем механическим величинам сопоставляются определенные математические операторы. Кинетической энергии частицы T и ее количеству движения \mathbf{P} сопоставляются операторы:

$$\left. \begin{aligned} T &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \\ P_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \\ P_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \\ P_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где e — заряд электрона, c — скорость света а \hbar — деленная на 2π постоянная Планка.

В классической механике кинетическая энергия частицы выражается через ее количество движения. Если m есть масса частицы, то в обычной нерелятивистской механике

$$T = \frac{1}{2m} P^2 \quad (2)$$

и в механике теории относительности

$$T = c \sqrt{m^2 c^2 + P^2}. \quad (3)$$

Как перенести эту связь на операторы? Очевидно, что между операторами T и \mathbf{P} не может быть тождественного соотношения, подобного классическому, так как T содержит дифференцирование по времени, а \mathbf{P} — дифференцирование по координатам. Но мы можем подчинить волновую функцию ψ особому условию, а именно: потребовать, чтобы результат применения к ней оператора кинетической энергии равнялся результату применения операторов, стоящих в правых частях написанных выше уравнений и выраженных через \mathbf{P} . Таким образом мы приходим в нерелятивистском случае к уравнению

$$T\psi = \frac{1}{2m} P^2 \psi. \quad (4)$$

В релятивистском же случае корень квадратный в выражении для кинетической энергии извлекается при помощи особых операторов $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$, и мы получаем для ψ уравнение

$$T\psi = c(m\alpha_4 + \alpha_1 P_x + \alpha_2 P_y + \alpha_3 P_z)\psi. \quad (5)$$

Волновая функция частицы зависит, кроме времени, от трех координат и от одной или двух добавочных переменных, о кото-

Эти операторы не будут подчиняться обычным правилам умножения, так что, например

$$E_x A_x \neq A_x E_x. \quad (10)$$

Для них будут иметь место особые правила умножения. Кроме этих правил умножения, потенциалы должны удовлетворять уравнениям

$$\Delta\Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = 0; \quad \Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (11)$$

Несмотря на наличие материи, эти уравнения имеют тот же вид, как для поля в пустоте. Действие материи на поле проявляется только в добавочном условии, которое соответствует классическому уравнению

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (12)$$

и имеет в нашей теории вид

$$C(x, y, z, t)\psi = 0, \quad (13)$$

где C есть оператор

$$C = \operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \sum_s e_s V_s, \quad (14)$$

причем V_s суть известные функции от координат и времен частиц и квантов.

Эти уравнения совместно с правилами умножения для операторов дают полную формулировку квантовой проблемы многих тел. Основной идеей, как я уже говорил, является здесь то, что частицы взаимодействуют друг с другом лишь через посредство поля. Характерной же особенностью формулировки является то, что для каждой частицы и для световых квантов вводится свое отдельное время и что все уравнения, за исключением одного, имеют формально тот же вид, как для свободных частиц и для поля в пустоте.

4. В предложенной Дираком и мною формулировке электростатические силы кулоновского типа явно не вводятся. Тем не менее эта формулировка оказывается эквивалентной обычной, в которой кулоново взаимодействие вводится явно. Как я показал в другой своей работе, это связано с тем, что система уравнений для волновой функции допускает своего рода разделение переменных.

Если разложить поле и потенциалы на плоские волны, то для каждого значения волнового вектора \mathbf{k} поле можно охарактеризовать четырьмя комплексными амплитудами скалярного и векторного потенциалов:

$$a_x, a_y, a_z, \varphi. \quad (15)$$

Сообразно этому можно сказать, что для каждого значения волнового вектора возможны четыре вида световых квантов. Но

вместо этих четырех амплитуд мы можем ввести четыре их комбинации, а именно: две составляющие векторного потенциала, перпендикулярные к волновому вектору:

$$b_1, b_2(a_{\perp}) \quad (16)$$

и затем параллельную к нему составляющую и амплитуду скалярного потенциала:

$$a_{\parallel}, \varphi. \quad (17)$$

Это соответствует разделению световых квантов на два типа. К первому типу относятся поперечные световые кванты, характеризуемые величинами b_1 и b_2 . Это световые кванты в собственном смысле: число их — два — соответствует двум возможным состояниям поляризации света. Ко второму типу относятся так называемые продольные световые кванты с амплитудами a_{\parallel} и φ . Оказывается, что именно они передают электростатические действия. Волновая функция ψ , удовлетворяющая написанной выше системе уравнений, содержит все четыре величины (16) и (17) или вернее четыре величины:

$$\overline{b}_1, \overline{b}_2, \overline{a}_{\parallel}, \varphi. \quad (18)$$

Но при помощи двух уравнений для амплитуд величины C , вытекающих из добавочного условия (13), можно найти общий вид зависимости ψ от \overline{a}_{\parallel} и φ , а именно:

$$\psi = \psi_0(a_{\parallel}, \varphi) \Omega(b_1, b_2), \quad (19)$$

где ψ_0 — известная функция. При любом виде функции Ω добавочное условие (13) будет выполняться тождественно. Что касается остальных уравнений (8), то от них можно перейти к уравнениям для самой функции Ω . Каждое из этих новых уравнений будет вида

$$i\hbar \frac{\partial \Omega}{\partial t_s} = H_s \Omega, \quad (20)$$

где H_s — оператор, который содержит члены кулоновского типа.

Физический смысл этого преобразования состоит в том, что мы исключили переменные, относящиеся к продольным световым квантам и взамен их получили кулоновы электростатические силы.

Теперь остается сделать последний шаг и положить все времена частиц и световых квантов совпадающими.

$$t_1 = t_2 = \dots = t_n = t = T. \quad (21)$$

Ввиду того что

$$i\hbar \frac{\partial \Omega}{\partial T} = i\hbar \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial \Omega}{\partial t_n} \right)_T, \quad (22)$$

теперь у нас получится для Ω только одно уравнение, в которое будет входить сумма правых частей уравнений (20). Это уравнение можно написать в виде

$$H\Omega - i\hbar \frac{\partial \Omega}{\partial T} = L\Omega. \quad (23)$$

Здесь H есть обычный оператор для полной энергии системы n частиц без световых квантов. В нерелятивистском приближении он имеет вид

$$H = \sum_{s=1}^n \frac{1}{2m_s} P_s^2 + \sum_{u>v} \frac{e_u e_v}{|r_u - r_v|} + U, \quad (24)$$

где U есть потенциальная энергия частиц во внешнем поле. Первая сумма представляет собой кинетическую энергию, а вторая — кулонову электростатическую энергию взаимодействия наших частиц. Оператор же L в правой части будет относиться к взаимодействию со световыми квантами: он будет давать реакцию излучения на нашу материальную систему. Во многих задачах этой реакцией излучения, а значит и оператором L , можно пренебречь, и тогда получится обычное уравнение Шредингера для многих тел.

Резюмируем теперь ход наших рассуждений. Мы исходили из представления о том, что частицы непосредственно взаимодействуют только со световыми квантами. Поэтому мы не вводили явно электростатического кулонова взаимодействия. Взаимодействие это получилось у нас автоматически, путем исключения продольных световых квантов.

Таким образом здесь окончательно решен старый вопрос о том, как согласовать представление о световых квантах с электростатикой. Кулоново взаимодействие между заряженными частицами оказывается не только не противоречит, но является непосредственным следствием представления о световых квантах. Вместе с тем выяснено, как согласовать нерелятивистский характер кулоновых сил с инвариантным характером теории. Исходные уравнения у нас инвариантны. Разделение же квантов на продольные и поперечные не инвариантно. Поэтому, хотя получающиеся при этом разделении кулоновские члены не имеют инвариантного характера, их неинвариантность компенсируется наличием в наших уравнениях оператора L , относящегося к световым квантам в собственном смысле.

5. Квантовая электродинамика, основные идеи которой я пытался изложить, представляет собою законченную схему, включающую в себя как квантовую механику в более узком смысле, так и взаимодействие частиц с излучением. В частности, эта теория позволяет определить естественную ширину спектральных линий. Схема эта может быть расширена на случай переменного числа материальных частиц, на случай рождения и уничтожения пар электронов и позитронов. Несмотря на все это, современная квантовая электродинамика страдает некоторыми коренными недостатками, которые

формально проявляются в том, что строгое решение ее уравнений оказывается в большинстве случаев невозможным вследствие расхождений некоторых интегралов и т. п. С особенной резкостью эти недостатки были подчеркнуты в работе харьковского физика Ландау (совместной с Пайерльсом), который анализировал физическую их причину. Ландау полагал даже, что квантовая электродинамика не дает ничего существенно нового по сравнению с классической. Этот крайний взгляд был впоследствии опровергнут Бором и Розенфельдом, которые исследовали границы приложимости квантовой электродинамики. В своем глубоком исследовании Бор и Розенфельд показали, что приложимость квантовой электродинамики кончается там, где начинает становиться существенной атомная структура измерительных приборов. По общему мнению всех физиков, расширение этих границ и установление новой, более общей теории, объединяющей квантовую механику и теорию относительности, требуют существенно новых идей, связанных с еще большим отказом от классических наглядных представлений, чем это имеет место в квантовой механике.

Здесь уместно упомянуть, что та же идея, которая лежит в основе работы Дирака, моей и Подольского, а именно идея о передаче взаимодействия через посредство квантов, — была с успехом применена ленинградским физиком Бронштейном к тяготению. Воспользовавшись математическим аппаратом, развитым в моей работе, он показал, что, введя гравитационные кванты, можно получить ньютоново взаимодействие между телами, причем оно имеет правильный знак, так что две массы будут всегда притягиваться, тогда как в электродинамике два одинаковые заряда, как известно, отталкиваются.

В популярной литературе до сих пор дискутируется время от времени вопрос о так называемом дальнодействии и близкодействии. В настоящее время, хотя этот вопрос и решен в пользу близкодействия, он вместе с тем утратил свою актуальность и даже отчасти свой смысл. В самом деле, с одной стороны, теория относительности принципиально не допускает никаких мгновенных дальнодействий, с другой стороны, мы не можем представлять себе и близкодействие столь же буквально и столь же наивно-механически, как это делалось 300 лет назад при возникновении этого старого спора. Ведь согласно квантовой механике световые и гравитационные кванты не могут быть даже строго локализованы в пространстве и времени, так что говорить о передаче взаимодействия от точки к точке через посредство промежуточной среды (эфира) не приходится. Тем не менее, если мы пожелаем пользоваться старыми терминами „дальнодействие“ и „близкодействие“, придавая им в случае надобности новый, обобщенный смысл, мы можем это сделать. Мы можем дать оценку изложенной мною теории с точки зрения этих старых понятий. Мы должны тогда сказать, что наша теория взаимодействия между частицами является последовательным проведением идеи близкодействия и что она выводит из этой идеи законы Кулона и Ньютона, не прибегая к мифическому представлению об эфире.

6. Я перехожу к изложению основной идеи моих работ—о приближенном методе решений квантовой задачи многих тел.

Предположим, что мы имеем атом с n электронами. Если пренебречь релятивистскими поправками и реакцией излучения на атом, то изложенная формулировка проблемы многих тел приводит к обыкновенному уравнению Шредингера, с написанным выше оператором энергии H . Для того чтобы найти стационарные состояния атома, т. е. состояния с определенной энергией, нужно решить уравнение Шредингера:

$$H\psi = E\psi,$$

где E есть параметр энергии. Функция ψ , удовлетворяющая этому уравнению, зависит от $3n$ координат

$$x_1, y_1, z_1; \dots; x_n, y_n, z_n \quad (26)$$

и от n переменных (спинов)

$$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n. \quad (27)$$

Каждая из этих последних принимает только два значения согласно двум возможным ориентировкам электрона. Эта функция должна менять знак при перестановке переменных, соответствующих двум разным электронам. Например:

$$\begin{aligned} & \psi(x_1, y_1, z_1, \sigma_1; x_2, y_2, z_2, \sigma_2; \dots) = \\ & = -\psi(x_2, y_2, z_2, \sigma_2; x_1, y_1, z_1, \sigma_1; \dots). \end{aligned} \quad (28)$$

Требование это носит название принципа Паули.

Вместо того чтобы считать σ_1 и σ_2 за независимые переменные, мы можем рассматривать их как значки у функций. Тогда мы можем сказать, что требуется найти 2^n функций от $3n$ переменных каждая. Для того чтобы получить представление о степени сложности этой задачи, рассмотрим атом натрия, содержащий 11 электронов, и атом меди с 29 электронами. Для атома натрия требуется найти $2^{11} = 2048$ функций от 33 переменных, а для меди 2^{29} , т. е. свыше полумиллиарда функций от 87 переменных каждая.

Совершенно ясно, что строгое решение такой задачи практически невыполнимо. Поэтому приходится прибегать к приближенным методам.

Идея предложенного мною метода состоит в следующем. Я формулирую задачу о решении уравнения Шредингера в виде вариационной задачи о нахождении минимума интеграла

$$W = \int \psi H \psi d\tau, \quad (29)$$

представляющего энергию атома. Волновую же функцию ψ я представляю в виде линейной комбинации функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, каждая из которых зависит только от переменных одного электрона:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} \pm \psi_{\alpha_1}(x_1, \sigma_1) \dots \psi_{\alpha_n}(x_n, \sigma_n). \quad (30)$$

Такую комбинацию вместо простого произведения:

$$\psi = \psi_1(x_1, \sigma_1) \dots \psi_n(x_n, \sigma_n) \quad (31)$$

приходится вводить для того, чтобы удовлетворить принципу Паули. Эту комбинацию я ввожу в выражение для энергии W и затем нахожу функции ψ_1, \dots, ψ_n из условия ее минимума. Для этих функций получаются уравнения вида

$$\left(\frac{1}{2m} P_s^2 + U_s \right) \psi_s - A_s \psi = E_s \psi_s. \quad (32)$$

Таким образом мы как бы вернулись к уравнениям для отдельных электронов.

В этих уравнениях U_s есть потенциальная энергия, происходящая от ядра и от остальных электронов, а A_s есть некоторый интегральный оператор. В своей работе я показал также, что если мы вместо линейной комбинации волновых функций, удовлетворяющих принципу Паули, возьмем простое произведение функций (31), то вариационное начало приведет нас к уравнениям вида (32), но без интегрального оператора A_s . Эти упрощенные уравнения были впервые предложены английским математиком Хартри и названы им уравнениями согласованного поля.

Характерное отличие моих уравнений от уравнений Хартри заключается в члене с интегральным оператором A_s . Остановимся подробнее на его толковании. Так как он добавляется к энергии электрона, то он сам представляет какую-то энергию. Но этот вид энергии неизвестен классической механике и представляет собою чисто квантовое явление. Член A_s произошел оттого, что вместо произведения функций отдельных электронов мы ввели линейную комбинацию таких произведений, удовлетворяющую принципу Паули. Таким образом он связан с принципом Паули. Но принцип Паули является выражением тождества электронов, выражением того, что ничто не изменится, если два электрона обменяются местами. Поэтому связанную с этим энергию принято называть энергией квантового обмена.

Понятие энергии квантового обмена было впервые введено Гейзенбергом и Гейтлером. В своей работе я показал, как ее можно учесть для атомов путем введения интегрального оператора A_s .

Выведенные мною уравнения, учитывающие квантовый обмен, были впервые решены моими сотрудниками в Оптическом институте в Ленинграде для атомов натрия и лития. Эти расчеты показали,

что энергия квантового обмена составляет значительную долю энергии валентного электрона в атоме. Если принять ее во внимание, то вычисленный уровень энергии атома отличается от наблюдаемого на 1 или 2⁰/₀, если же ее отбросить, то ошибка повышается до 20 или 30⁰/₀.

Еще более значительна роль квантового обмена в теории молекул в квантовой химии. Оказывается, что самое существование молекул из двух одинаковых атомов обусловлено наличием этой энергии, тогда как по классической механике такого рода молекулы вообще не могли бы существовать.

Изложенный способ приближенного решения задачи многих тел с учетом энергии квантового обмена, разработанный мною для атомов, нашел многочисленные применения. Так, он был применен Таммом и Бриллюэном в теории твердых тел, Дираком — в теории позитронов и, наконец, в недавнее время Гейзенбергом — в теории ядра.

Способ этот дает для атомов довольно точные результаты, но требует сравнительно сложных вычислений. Поэтому я хотел бы упомянуть о другом предложенном мною способе, о котором я докладывал здесь в марте прошлого года. Этот новый способ основан на свойствах волновых функций атомов водородного типа. Принципиальный интерес его заключается в том, что в нем используется симметрия водородоподобных атомов, которая, как я показал, совпадает с симметрией шара в пространстве четырех измерений. Эта симметрия позволяет чрезвычайно просто формулировать свойства атомов с замкнутыми слоями электронов. В настоящее время имеется уже для атомов натрия, алюминия, меди и цинка числовой материал, который приводит к заключению, что новый способ способен при всей его простоте давать весьма удовлетворительные по точности результаты.
