

ПРИНЦИПИАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ В ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ *

В. А. Фок, Ленинград

1. Задача теоретической физики — математическая формулировка законов природы. Задача эта тесно связана, но отнюдь не совпадает, с задачей математической физики — решением поставленных теоретической физикой уравнений.

Уравнения теоретической физики никогда не бывают, да и не могут быть, абсолютно точными: при их выводе всегда пренебрегают теми или иными второстепенными факторами.

Правильный учет всех действительно существенных в данной физической задаче факторов можно назвать физической строгостью. Физическая строгость столь же необходима при решении физических задач, как обычная математическая строгость — при решении задач анализа.

Одним из наиболее важных и трудных вопросов, возникающих в каждой отдельной области теоретической физики, является вопрос о том, в какой мере выполняются при постановке и решении задач данной области требования физической и математической строгости. Такого рода исследование особенно важно для области элементарных физических законов — области, примыкающей к теории строения материи.

Целью настоящей статьи не является, однако, попытка дать такого рода анализ физической строгости существующей формулировки элементарных физических законов. Мне хотелось бы остановиться здесь на другом, хотя и тесно связанном с этим вопросе, а именно на самом процессе образования физических понятий.

Предположим, что мы имеем одну более общую физическую теорию и другую более частную; эта частная теория содержится в общей как частный случай. Переход от частной теории к общей, несомненно, связан с введением новых физических понятий. На эту сторону процесса образования понятий — приобретение новых понятий в результате обобщения теории — чаще всего и обращается наше внимание. Но развитие физики за последние десятилетия показало, что с обобщением теории связан и обрат-

* Доложено 21 марта 1936 г. в заседании математической группы Академии наук СССР.

ный процесс, а именно отказ от старых физических понятий. Рассмотрим, например, классическую механику Ньютона и механику частной теории относительности (эта частная теория является в данном случае, т. е. по сравнению с механикой Ньютона, более общей). В механике Ньютона мы имели дело с абсолютным временем; понятие одновременности двух событий не требовало никаких оговорок (указаний координатной системы и т. п.) и было в этом смысле понятием абсолютным. В теории относительности понятие абсолютной одновременности утрачивается; может даже случиться, что без особых оговорок нельзя будет сказать, которое из двух событий наступило раньше, а которое позже. Одновременность становится понятием приближенным, применимым только в тех случаях, когда можно пренебречь промежутком времени, который затрачивается светом на прохождение расстояния между теми точками, где происходят рассматриваемые события (для событий на Земле и на Солнце этот промежуток времени составляет около 500 сек.). Таким образом обобщение физических теорий связано не только с приобретением новых понятий, но и с отказом от старых. Здесь необходимо отметить следующий психологический фактор: отказ от старых, привычных физических понятий дается несравненно труднее, чем усвоение новых понятий, не связанных с таким отказом.

Чтобы ясно представить себе необходимость такого рода отказа, мы попытаемся проследить процесс образования понятий в направлении, в известном смысле обратном историческому развитию теории. Если идти в этом направлении, то мы должны будем исходить из наиболее общей известной в данный момент физической теории; мы убедимся, что при каждом ее упрощении, при каждом переходе к более частной теории будут возникать все новые и новые физические понятия. Но тогда будет ясно, что обратный процесс — переход от более частной теории к более общей — должен быть связан с отказом от некоторых физических понятий.

Мы выбираем такой способ рассмотрения — последовательное упрощение теории — потому, что его легче проследить с математической точки зрения. Переход к упрощенной теории означает по существу применение того или иного приближенного метода, основанного на возможности пренебречь в данной задаче теми или иными второстепенными факторами, теми или иными малыми величинами. Законность применения данного приближенного метода — его физическую строгость — бывает возможно оценить при помощи обыкновенных математических неравенств, характеризующих малость тех величин, которые в данном методе отбрасываются. Но эта „оценка погрешности“ в обычном смысле дает вместе с тем оценку применимости тех физических понятий, которые связаны с данным приближенным методом. Таким образом более трудный логический, или, если угодно, даже философский, вопрос о применимости определенных физических понятий получает здесь конкретное математическое выражение. Тем самым

выясняется принципиальное значение приближенных методов в теоретической физике.

2. Как мы уже говорили, уравнения теоретической физики никогда не бывают абсолютно точными. Даже и та теория, которая на данном этапе развития физики является наиболее общей, не может претендовать на универсальность, так как она содержит в себе ряд физических пренебрежений. Поэтому, приступая к формулировке такой теории, необходимо прежде всего выяснить, каковы эти пренебрежения и чем ограничена применимость тех основных физических понятий, с которыми данная теория оперирует. Одной из наиболее общих существующих физических теорий является квантовая электродинамика. Теория эта не входит в рассмотрение природы атомной структуры материи, а принимает ее как экспериментальный факт. Структура материальных частиц в ней не рассматривается, а эти частицы характеризуются суммарно некоторыми константами, в частности их зарядом и массой. Масса частицы — понятие приближенное. По теории относительности масса m связана с энергией mc^2 ; но если две частицы взаимодействуют столь сильно, что их энергия взаимодействия становится сравнимой с энергией mc^2 , то понятие массы частицы теряет однозначный смысл. Столь значительная энергия взаимодействия наблюдается в ядерных процессах и проявляется в нарушении строгой аддитивности масс; так например, масса α -частицы, состоящей из двух протонов и двух нейтронов, оказывается меньшей суммы масс составных частей на величину, равную их энергии взаимодействия, деленной на c^2 . Для электронов, вследствие их малой массы и большей энергии взаимодействия, понятие массы теряет смысл раньше, чем для более тяжелых частиц (протонов и нейтронов); поэтому нельзя говорить об электронах в ядре как об отдельных частицах. Все эти внутриядерные процессы выходят за пределы квантовой электродинамики.

Что касается заряда частиц, то он обладает свойством принимать значения, кратные определенному элементарному заряду, так что по отношению к ним аддитивность, повидимому, соблюдается. Но зато самое число материальных частиц не является постоянным. Опыты последних лет показали, что под действием излучения достаточно высоких частот могут создаваться пары частиц с одинаковой массой, но с зарядами противоположного знака (электроны и позитроны).

Если мы не будем рассматривать внутриядерных процессов, не будем интересоваться структурой материальных частиц и пренебрежем возможностью образования пар*, то мы можем пользоваться квантовой электродинамикой в той форме, в какой она развита, например, в работах Гейзенберга и Паули или Дирака, моей и Подольского.

Идея квантовой электродинамики состоит в том, что собрание заданного числа n материальных частиц и неопределенного

* Возможность образования пар может быть учтена и в рамках существующей теории.

числа световых квантов рассматривается как одна система. Эта система, состоящая из материи и электромагнитного поля, обладает бесконечным числом степеней свободы. Если мы будем обозначать переменные, относящиеся к отдельной материальной частице (координаты и так называемый спин), буквой x , а переменные, относящиеся к световому кванту (волновой вектор и поляризацию соответствующей плоской волны), буквой k , то состояние такой системы может быть описано при помощи последовательности функций

$$\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_N, \dots \quad (1)$$

где

$$\psi_N = \psi(x_1, x_2, \dots, x_n; k_1, k_2, \dots, k_N), \quad (2)$$

причем функция ψ_N должна быть симметричной относительно переменных k_1, k_2, \dots, k_N . Вместо этой последовательности функций можно рассматривать, как я показал¹, одну величину, а именно функционал Ω от некоторой вспомогательной функции $\bar{b}(k)$. Функционал этот имеет вид

$$\Omega = \psi_0 + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \psi_N \bar{b}(k_1) \dots \bar{b}(k_N) dk_1 \dots dk_N. \quad (3)$$

Для физического толкования этого функционала достаточно дать выражение для „скалярного произведения“ двух функционалов Ω и Ω' . Это скалярное произведение (Ω, Ω') имеет тот же физический смысл, как скалярное произведение

$$(\psi, \psi') = \int \bar{\psi} \psi' d\tau$$

двух обыкновенных волновых функций в квантовой механике.

Если функционал Ω имеет вид (3), а функционал Ω' составлен аналогичным образом при помощи функций ψ'_N , то их скалярное произведение (Ω, Ω') будет иметь вид

$$(\Omega, \Omega') = \int dx_1 \dots dx_n \left\{ \bar{\psi}_0 \psi'_0 + \sum_{N=1}^{\infty} \int \bar{\psi}_N \psi'_N dk_1 \dots dk_N \right\}. \quad (4)$$

Если положить здесь $\Omega' = \Omega$, так что $\psi'_N = \psi_N$ то отдельные члены этого выражения могут быть истолкованы как вероятности.

Так например, интеграл

$$\int dx_1 \dots dx_n \int \bar{\psi}_N \psi_N dk_1 \dots dk_N \quad (5)$$

есть вероятность того, что имеется ровно N световых квантов.

Зависимость от времени функционала Ω определяется уравнением вида

$$H\Omega - i\hbar \frac{\partial \Omega}{\partial t} = \sqrt{\alpha} \int \left\{ G^+(k) \frac{\delta' \Omega}{\delta \bar{b}(k)} + G(k) \bar{b}(k) \Omega \right\} dk, \quad (6)$$

где $\frac{\delta' \Omega}{\delta \bar{b}(k)}$ есть функциональная производная от Ω по $b(k)$, определяемая как коэффициент при $\delta \bar{b}(k)$ в выражении для вариации

$$\delta \Omega = \int \frac{\delta' \Omega}{\delta \bar{b}(k)} \delta \bar{b}(k) dk. \quad (7)$$

Величины $G(k)$ и $G^+(k)$ суть некоторые известные операторы. Стоящий в левой части уравнения (6) оператор H представляет обычный оператор для полной энергии системы n материальных частиц

$$H = \sum_{s=1}^n T_s + \sum_{u>v=1}^n \frac{e_u e_v}{|r_u - r_v|}. \quad (8)$$

Правая же часть уравнения (6) представляет оператор энергии взаимодействия частиц с излучением (взятый с обратным знаком). В правой части стоит множителем величина $\sqrt{\alpha}$, где α есть так называемая постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{hc} = \frac{1}{137,3}. \quad (9)$$

Вывод уравнения (6) является математически нестрогим. Например, при составлении оператора H [формула (8)] выкладки приводят к двойной сумме, в которой имеются члены с $u=v$; эти члены приходится просто вычеркивать, мотивируя это тем, что они представляют собой бесконечно большую постоянную. Такого рода нестрогости, которые являются следствием лежащих в основе теории пренебрежений, несомненно, являются крупным ее недостатком. Тем не менее, в данной приближенной теории эти нестрогости физически необходимы. Они представляют по существу грубый прием, посредством которого исправляются недостатки первоначальной формулировки, неправильно учитывающей, например, роль световых квантов с весьма большой энергией.*

Не только вывод волнового уравнения (6), но и решение его никак не может быть названо математически строгим. Формально приближенные методы решения этого уравнения основаны на малости входящего в его правую часть параметра $\sqrt{\alpha}$. Физически малость эта соответствует второстепенной роли взаимодействия

* Предпосылки теории, несомненно, перестают быть верными при частотах, для которых энергия кванта $h\nu$ становится порядка $\frac{mc^2}{\alpha}$, где m — масса электрона; между тем при выводе формул квантовой электродинамики приходится интегрировать по ν до бесконечности.

частиц с излучением по сравнению с взаимодействием их между собой — факту, установленному на опыте. Однако попытка, искать решения волнового уравнения в виде ряда, расположенного по степеням $\sqrt{\alpha}$, приводит к разумным результатам, только если брать в этом ряду малое число членов, отбрасывая члены порядка выше α или выше α^2 . Дальнейшим членам нельзя приписывать физического смысла, так как они содержат выражения такого типа: малый коэффициент, умноженный на расходящийся интеграл. Таким образом, чтобы соблюсти здесь минимум физической строгости, приходится поступаться строгостью математической.

Тем не менее, несмотря на все свои недостатки, теория, основанная на волновом уравнении (6), правильно описывает весьма обширный класс физических явлений. Она с большой степенью точности передает процессы излучения атомов и молекул и позволяет определить не только частоты, но и естественную ширину спектральных линий. Она приводит к правильной формуле для рассеяния света свободными электронами (формула Клейна-Нишины). Наконец, она дает поправки к кулоновскому закону взаимодействия между электронами; поправки эти происходят от испускания и поглощения электронами световых квантов (в классической теории соответствующая поправка толковалась как учет запаздывания потенциалов).

3. От квантовой электродинамики, основные идеи которой мы пытались передать, мы перейдем теперь к обыкновенной квантовой механике.

Предметом квантовой электродинамики являлась, в первую очередь, формулировка законов взаимодействия материальных частиц с излучением. При учете этого взаимодействия атом, находящийся в возбужденном состоянии (т. е. обладающий не наименьшей возможной энергией, а более высокой), имеет вероятность испустить световой квант и перейти на более низкий энергетический уровень. Продолжительность пребывания атома в возбужденном состоянии не будет неограниченной, так что это состояние не будет строго стационарным (с этим и связана естественная ширина спектральных линий). Если же мы пренебрежем взаимодействием атома с излучением, то мы придем к новому физическому понятию о стационарном состоянии атома.

Мы получим возможность говорить об атоме как о механической системе в собственном смысле. Таким образом возникает понятие о механической системе, связанное с пренебрежением взаимодействием материи с излучением.

Но мы можем сделать еще один шаг: пренебречь поправками на теорию относительности. Это пренебрежение допустимо при условии, что скорости составных частей материальной системы малы по сравнению со скоростью света:

$$\frac{v}{c} \ll 1. \quad (10)$$

Для электронов в атоме отношение $\frac{v}{c}$ будет порядка

$$\frac{v}{c} \sim \alpha = \frac{1}{137,3}, \quad (11)$$

так что для электронов это пренебрежение, строго говоря, связано с пренебрежением излучением. (Напомним, что в формуле (6) энергия взаимодействия материальных частиц с излучением содержит множителем $\sqrt{\alpha}$).

С пренебрежением поправками на теорию относительности связано приобретение новых физических понятий о разделности пространства и времени и об абсолютной одновременности.

Сделанные пренебрежения приводят нас к упрощенной постановке задачи: от квантовой электродинамики мы переходим к квантовой механике (в собственном смысле) и к теории Шредингера. Формально пренебрежение излучением соответствует вычеркиванию правой части уравнения (6) и замене функционала Ω его „нулевым“ членом разложения ψ_0 . Пренебрегая затем поправками на теорию относительности, мы приходим к обыкновенному уравнению Шредингера

$$H\psi = i\hbar \frac{d\psi}{dt}, \quad (12)$$

в котором оператор энергии имеет вид (8). Если добавить к этому оператору потенциальную энергию частиц во внешнем поле [опущенную в уравнении (8)], то оператор H примет вид

$$H = - \sum_{s=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_s} \Delta_s + \sum_{s=1}^n U_s(x_s) + \sum_{\alpha > \nu=1}^n \frac{e_\alpha e_\nu}{|r_\alpha - r_\nu|}, \quad (13)$$

где Δ_s есть оператор Лапласа, действующий на координаты частицы номер s .

Теория, основанная на уравнении Шредингера, гораздо более удовлетворительна в математическом отношении, чем квантовая электродинамика. Здесь задача может быть сформулирована совершенно строго (в математическом смысле). Нестрогости, допускаемые при ее решении, обусловлены исключительно сложностью задачи, а не недочетами исходных уравнений, как это имеет место в квантовой электродинамике.

В физическом отношении эта теория — квантовая механика в собственном смысле — представляет законченную логическую схему, оперирующую с понятиями, достаточно строго определенными. Во всех тех случаях, где оказываются выполненными лежащие в основе этой теории предпосылки (из которых главнейшие были перечислены нами выше), расчеты, произведенные на основе квантовой механики, если только они произведены с достаточной точностью, приводят к полному согласию с опытом. Предпосылки теории

выполняются в большинстве задач, относящихся к атомам и молекулам; таким образом квантовая механика охватывает теорию строения и взаимодействия атомов и молекул, включая всю химию.

Согласно квантовой механике, состояние механической системы описывается волновой функцией ψ , удовлетворяющей уравнению Шредингера (12). Знание волновой функции дает нам все сведения о системе, которые можно получить в результате определенного максимально точного опыта над ней. Под максимально точным опытом мы разумеем такой, в результате которого получают значения всех тех механических величин, какие вообще могут быть измерены одновременно (измерения разных величин могут друг другу мешать). Максимально точные опыты могут быть различны, смотря по выбору измеряемых величин. Можно также сказать, что физический смысл волновой функции заключается в том, что она представляет запись сведений о системе, получаемых в результате определенного максимально точного опыта. Смысл же волнового уравнения (12) заключается в том, что оно позволяет перейти от опытных данных или сведений, относящихся к начальному моменту време и (начальное значение волновой функции), к сведениям, относящимся к позднему моменту времени (значение ψ во время t). Записанные в форме волновой функции сведения о системе позволяют также вычислить вероятности различных результатов последующего измерения разных величин, а также математические ожидания этих величин.

Мы не будем останавливаться здесь на вопросе о записи получаемых из опыта данных для того случая, когда этот опыт не является максимально точным*, а обратим внимание на следующее обстоятельство, которое важно для нашего анализа процесса образования физических понятий.

В квантовой механике понятие состояния системы сливается с понятием максимально точных сведений или данных, которые можно получить о состоянии. С этим связано то, что законы квантовой механики приводят к выводу о невозможности объективного описания детального хода физических процессов. В самом деле, описание при помощи волновой функции не является объективным в обычном смысле**. Это особенно ясно видно на примере так называемого распыления волнового пакета. Согласно квантовой механике свободная частица, начальное положение и количество движения которой известны с точностью, допускаемой неравенством Гейзенберга

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar, \quad (14)$$

* Математическая сторона этого вопроса подробно освещена в книге И. Неймана².

** По этому вопросу см. статьи А. Эйнштейна и Н. Бора, которые напечатаны совместно со вступительной статьей автора под общим заглавием „Можно ли считать, что квантовомеханическое описание физической реальности является полным?“³.

описывается функцией ψ , представляющей „волновой пакет“, т. е. заметно отличной от нуля только в некоторой нерезко ограниченной области пространства. Пакет этот состоит из наложения плоских волн, направления и частоты которых не вполне одинаковы. Уравнение Шредингера показывает, что с течением времени пакет этот расплывается, т. е. волновая функция становится отличной от нуля во все более и более широкой области. Между тем, так как частица свободна, то с ней, очевидно, при этом никаких объективных изменений не происходит. Происходит только утрата наших сведений о локализации частицы в пространстве. (Это связано с тем, что, говоря языком классической механики, свободное движение частицы является неустойчивым в смысле Ляпунова). Отсюда ясно, что описание состояния посредством волновой функции не является объективным. Вместе с тем, это описание полностью передает все то, что мы можем получить в результате максимально точных измерений, и является поэтому выражением объективно существующих законов природы. Необходимость же именно такого необъективного описания вытекает из невозможности согласовать иным путем волновую и корпускулярную природу материи, одинаково твердо установленную на опыте.

Другой характерной особенностью квантовой механики является то, что знание состояния (волновой функции) всей системы, например всего атома, не означает еще знания состояний (волновых функций) отдельных частей системы, например отдельных электронов в атоме. С этим связано то, что опыт, который является максимально точным по отношению ко всей системе, не является таковым по отношению к отдельным частям системы.

Таким образом в квантовой механике существуют уже понятия о массе и заряде частиц, о механической системе в собственном смысле (т. е. не зависящей от излучения), о стационарных состояниях системы (например, атома или молекулы), но там нет еще понятий о состоянии отдельных частиц, образующих систему (электронов в атоме), и об объективном описании детального хода физических процессов.

4. Мы выяснили, с какими физическими понятиями оперирует квантовая механика. Перейдем теперь к рассмотрению приближенных методов решения задач квантовой механики и к выяснению тех новых физических понятий, которые при этом возникают.

Задача об определении стационарных состояний систем приводит к решению уравнения вида

$$H\psi = E\psi, \quad (15)$$

т. е. к нахождению собственных функций оператора энергии H . Если система состоит из одинаковых частиц, например из электронов, находящихся в поле атомного ядра, то волновая функция ψ должна удовлетворять, кроме уравнения (15), требованию антисимметрии: она должна менять знак при перестановке аргументов, относящихся к двум электронам. Напишем:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = -\psi(x_2, x_1, \dots, x_n), \quad (16)$$

Это условие, которое является выражением принципа Паули, совместимо с уравнением (15), так как в случае одинаковых частиц оператор энергии H симметричен относительно них. В случае электронов каждый аргумент x функции ψ представляет совокупность трех пространственных координат x, y, z и еще одной переменной σ , принимающей только два значения. Эта переменная соответствует, в известном смысле, ориентации электрона (так называемому спину). Таким образом в случае n электронов требуется найти одну функцию от переменных

$$x_s, y_s, z_s, \sigma_s \quad (s = 1, 2, \dots, n), \quad (17)$$

или, что то же самое, 2^n функций от $3n$ переменных

$$x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots x_n, y_n, z_n. \quad (18)$$

Чтобы получить представление о степени сложности этой задачи, достаточно вспомнить, что, например, для атома натрия $n = 11$, так что требуется найти $2^{11} = 2048$ функций от 33 переменных каждая, а для атома меди $n = 29$, и там требуется определить свыше полумиллиарда функций от 87 переменных.

Совершенно ясно, что строгое решение такой задачи невозможно и что необходимо прибегать к приближенным методам.

Одним из основных методов, применяемых в квантовой механике, для решения такого рода задач является известный метод Ритца, вернее, его видоизменение. Возможность применения его основана на том, что рассматриваемую задачу можно формулировать в виде следующей вариационной задачи: требуется найти минимум интеграла

$$W = \int \psi^* H \psi d\tau, \quad (19)$$

представляющего энергию атома, при условии

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1 \quad (20)$$

т. е. при условии нормировки волновой функции.

Искомую функцию ψ можно приближенно представить в виде линейной комбинации произведений функций $\varphi_s(x_s)$, зависящих от переменных одного электрона каждая. Чтобы удовлетворить принципу Паули (16), нужно брать антисимметричную комбинацию

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \varepsilon_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \varphi_{\alpha_1}(x_1) \dots \varphi_{\alpha_n}(x_n), \quad (21)$$

где ε есть величина, антисимметричная относительно своих значков, причем $\varepsilon_{123 \dots n} = 1$. Функции $\varphi_s(x)$ можно предполагать ортогональными и нормированными;

$$\int \varphi_s(x) \varphi_r(x) dx = \delta_{sr} \quad (22)$$

Если подставить в (19) выражение (21) для ψ (которое можно также писать в виде определителя), то получится энергия атома W ,

выраженная через функции $\varphi_s(x)$. Варьируя энергию W по функциям $\varphi_s(x)$ при добавочных условиях (22), мы получим для этих функций уравнения вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_s(x) + U_s(x) \varphi_s(x) - A_s \varphi_s(x) = E_s \varphi_s(x). \quad (23)$$

Здесь $U_s(x)$ есть некоторая функция от координат, зависящая от всех искомым функций, кроме $\varphi_s(x)$; величина $U_s(x)$ играет роль потенциальной энергии. Символ A_s означает некоторый интегральный оператор, также зависящий от всех искомым функций, кроме $\varphi_s(x)$. Таким образом, если считать все функции, кроме $\varphi_s(x)$, известными, то для $\varphi_s(x)$ получается линейное интегро-дифференциальное уравнение.

Уравнения (23) были впервые выведены мной в 1929—1930 г.

Заметим, что в рассчитанных случаях (атомы лития, натрия и др.) уровни энергии получаются весьма близкими к экспериментальным; погрешность не превышает 1—2%. Таким образом рассматриваемый приближенный метод дает довольно точную формулировку нашей весьма сложной физической задачи.

В чем же состоит принципиальное значение этого метода? В нем волновая функция всего атома приближенно выражена через волновые функции отдельных электронов. Но это значит, что мы приобрели новое физическое понятие, а именно понятие о том, что электроны в атоме также находятся в определенных состояниях. (Как мы отмечали выше, в точной теории Шредингера понятие это отсутствовало).

Понятие это особенно важно потому, что на его основе построена боровская схема электронных оболочек атома, объясняющая структуру периодической системы элементов Менделеева.

Но это еще не все. В наши уравнения (23) входит, кроме члена $U_s(x)$, который может быть истолкован как потенциальная энергия, происходящая от атомного ядра и от остальных электронов, еще один член, а именно A_s . Этот член представляет новый вид энергии, неизвестный как классической механике, так и точной теории Шредингера, а именно так называемую энергию квантового обмена. (Название это произошло от того, что член A_s получается вследствие учета принципа Паули, который является выражением тождества электронов, т. е. того факта, что ничто не изменится, если два электрона обменяются местами).

Таким образом мы приобрели еще одно новое физическое понятие—понятие об энергии квантового обмена. Понятие это играет весьма большую роль как в теории атомов (отражение члена A_s повышает погрешность с 1—2% до 20—30%), так и в особенности в теории молекул (понятие это было впервые введено Гейзенбергом и Гейтлером в применении к молекулам). Оказывается, что самое существование гомеоплярных молекул (составленных из одинаковых атомов) невозможно объяснить без учета энергии квантового обмена. Таким образом это новое понятие играет решающую роль в квантовой химии.

5. Дальнейшим и, пожалуй, наиболее важным методом приближенного решения задач квантовой механики является теория возмущений. Идея ее заключается, как известно, в том, что гильбертово пространство, характеризующее многообразие всех возможных состояний системы и обладающее бесконечным числом измерений, заменяется некоторым подпространством с конечным числом измерений. Это подпространство выбирается так, чтобы оно соответствовало именно тем состояниям системы, которые играют в данной задаче наиболее важную роль. Если число измерений этого подпространства в свою очередь велико, то для исследования его приходится прибегать к особым методам, чаще всего к методам теории групп.

Упрощающим обстоятельством в такого рода исследованиях является, во-первых, свойство антисимметрии волновой функции, а, во-вторых, то, что хотя сама волновая функция зависит от спиновых переменных, но оператор энергии в шредингеровском приближении от них не зависит. Это позволило Дираку формулировать задачу теории возмущений путем введения операторов (конечных матриц), действующих на спиновые переменные. Эти операторы могут быть истолкованы как спиновые моменты количества движения отдельных электронов, а соответствующие члены в выражении для энергии—как энергия взаимодействия этих спиновых моментов. Это новое физическое понятие оказывается чрезвычайно полезным при истолковании спектров сложных атомов.

Одним из наиболее замечательных применений теории возмущений, основанной на тех же идеях, является предложенная Вейлем теория спиновых инвариантов. Математическая схема этой теории оказывается вполне эквивалентной схеме химических соединений, получаемых на основе теории валентности*. Таким образом это применение приближенных методов теории возмущений приводит к новому физическому (или, если угодно, химическому) понятию о химической валентности.

Мы перейдем теперь к области, пограничной между квантовой механикой и классической, и рассмотрим для простоты уравнение Шредингера для одной частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(x, y, z)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (24)$$

Если соответствующее классическое движение материальной частицы таково, что для него имеет место неравенство

$$\frac{mv^3}{\omega} \gg \hbar, \quad (25)$$

где v —скорость частицы, а ω —ее ускорение, то решение уравнения Шредингера (24) может быть с большой степенью прибли-

* См., например, статью М. Борна.

жения выражено через решение классического уравнения Гамильтона—Якоби

$$\frac{1}{2m} (\text{grad } S)^2 + U(x, y, z) - \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (26)$$

Если S есть полный интеграл уравнения (26), содержащий три произвольные постоянные c_1 , c_2 и c_3 , то волновая функция ψ приближенно выражается через S следующим образом:

$$\psi = \sqrt{\left\| \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial c_k} \right\|} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S}. \quad (27)$$

Для стационарных состояний можно положить

$$S = -Et + V(x, y, z) \quad (28)$$

и заменить показательную функцию выражением вида

$$e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \cos\left(\frac{V}{\hbar} + \alpha\right), \quad (29)$$

где α — постоянная фаза.

Этот приближенный метод, принадлежащий Венцелю и Бриллюэну, приводит нас к так называемой старой квантовой механике и всем связанным с нею физическим понятиям. Из предельных условий для волновой функции получаются характерные для этой теории правила квантования.

Наконец, в некоторых явлениях могут стать несущественными ограничения, налагаемые неравенствами Гейзенберга (14), в результате чего волновой характер материи отступает на второй план. Тогда вступает в силу классическая механика с ее привычными для нас представлениями. Появляются новые (а исторически—старые) физические понятия об объективном описании хода процессов, о траектории частицы и о том, что всякая механическая величина всегда имеет определенное значение.

Наш обзор, в котором ход исторического развития механики и физики до известной степени обращен, быть может, поможет разобраться и в историческом ходе развития физических понятий. Мы хотели показать, что всякая физическая теория, всякое физическое понятие по существу является лишь приближенным. Всякий крупный прогресс физической науки связан не только с созданием новых понятий, но и с критическим пересмотром старых. И если при этом будет доказано, что некоторые из старых понятий к вновь открытым явлениям неприменимы, то нужно без сожаления с ними расставаться.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Fock, Zur Quantenelektrodynamik, Sow. Phys., 6, 425, 1934.
2. J. v. Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik Berlin, Springer, 1932.
3. В. Фок, А. Эйнштейн, Б. Подольский и Н. Розен, Н. Бор, Успехи физич. наук, 16, 436, 1936.
4. М. Борн, Химическая связь и квантовая механика, ОНТИВУ, Харьков 1932.