

УДК 539.182

Голод П. І., Терентьєва Ю. Г.

КВАЗІКЛАСИЧНА МОДЕЛЬ АТОМА (ДО 100-РІЧЧЯ АТОМНОЇ МОДЕЛІ БОРА)

У статті подано історичний контекст, в рамках якого Н. Бор сформулював модель атома. Викладено подальший розвиток квантових уявлень: від квазікласичного квантування до творення сучасної квантової механіки.

Ключові слова: атом Бора, атомні спектри, стала Рідберга, квазікласичне квантування.

Після видатних експериментів Е. Резерфорда [7], які 1911 року привели до відкриття атомного ядра, проблема будови атома набула особливої гостроти. **Планетарна модель**, яку запропонував Резерфорд, була єдиною можливою, якщо вважати, що електрони в атомі рухаються відповідно до законів класичної механіки. За десять років до цього фізиків цілком задовольняла **осциляторна модель**, яка, по суті, була запропонована Лоренцом ще до відкриття електрона. (На основі цієї моделі Лоренц пояснив ефект Зеемана і побудував адекватну теорію дисперсії світла в речовині.) Модель Томсона, відповідно до якої атом уявлявся у вигляді позитивно зарядженої краплі, у якій «плавають» електрони, з принципової точки зору була прийнятною, оскільки забезпечувала стійкість атома. Випромінювання такої системи інтерпретувалося як результат коливального руху електронів навколо положення рівноваги. Але спектри в такому разі мають осциляторний (еквідистантний) характер, що не узгоджувалося з результатами реальних спостережень, зокрема спектрів атома водню: спектральні серії Бальмера, Лаймана і Пашена мають точку згущення. Глибоко проникливий та ерудований вчений А. Пуанкаре 1904 року писав з цього приводу: *«На перший погляд спектральні розподіли приводять нас до думки про гармоніки, з якими ми вже зустрічалися в акустиці. Проте тут є суттєва відмінність: хвильові числа не кратні одній і тій самій величині і не подібні*

до коренів тих трансцендентних рівнянь, до яких приводять задачі математичної фізики, такі, наприклад, як задача про колювання стержня, чи задача про резонатор Герца. Закони спектральних ліній простіші, але вони мають зовсім іншу природу... Ці закономірності ще не пояснені, але я думаю, що тут перед нами одна з найважливіших таємниць природи» [5, с. 249].

Планетарна модель Резерфорда, попри всю свою очевидність і привабливість, з точки зору класичної механіки не могла бути прийнятною для атома. На відміну від планет Сонячної системи, електрони мають заряд, а їхній рух по колових чи еліптичних орбітах неодмінно породжує змінний струм, а отже, і електромагнітне випромінювання. Випромінюючи, електрон втрачає енергію і за лічені доли секунди впаде на ядро. Класичні уявлення про рух заряджених частинок у застосуванні до атома зазнавали краху!

У квітні 1913 року до найпрестижнішого на той час наукового журналу "Philosophical Magazine" за поданням Е. Резерфорда надійшла стаття молодого датчанина Нільса Бора: «Зв'язування електронів додатним ядром». Це була перша частина досить об'ємної праці під загальною назвою *«Про будову атомів і молекул»*. Друга і третя частини, опубліковані у тому ж журналі протягом вересня-листопада 1913 року, називалися: *«Системи, які мають лише одне ядро»* та *«Системи з декількома ядрами»*. У цих працях Н. Бор на основі планетарної мо-

делі Резерфорда у поєднанні з квантовою ідеєю М. Планка робив рішучу спробу пояснити будову атомів, їхню стійкість та закономірності атомних спектрів. Ці та наступні праці стали каталізатором ідей, які через 12 років привели до створення нової науки – квантової механіки.

У статті Бора насправді не було обґрунтування стійкості атома: цей емпіричний факт приймався як постулат. Постулював він також і деякі інші властивості атома. Усього у статтях Бора було аж п'ять постулатів. У сучасних підручниках наводять два, іноді три – ті, що пройшли перевірку часом. Їх достатньо для отримання основних результатів стосовно будови атома і атомних спектрів, які отримав Бор. Два перші постулати такі:

1. Атом і атомні системи (молекули) можуть перебувати в динамічно-рівноважних станах – **стаціонарних станах**, у яких вони не випромінюють (незважаючи на рух заряджених частинок!). У цих станах атомні системи мають фіксовані значення енергії та їхній рух описується рівняннями класичної механіки, але переходи між різними стаціонарними станами не можна трактувати як класичний рух.

2. При переході з одного стаціонарного стану з енергією E_m в інший з енергією E_n атоми випромінюють ($E_m > E_n$) або поглинають ($E_m < E_n$) світло фіксованої частоти $\omega = 2\pi\nu$, яка відповідно до теорії Планка, визначається за формулою: $\hbar\omega = E_m - E_n$.

Наведені формулювання не є точним перекладом оригінального тексту статті [6], проте адекватно передають їхній зміст.

Третій постулат (у Бора він фігурує під четвертим номером) був сформульований так: «Стаціонарні стани простої системи, що складається з одного електрона, який обертається навколо позитивного ядра, мають енергію, відношення якої до частоти обертання електрона є цілим кратним до $\hbar/2$ ». Легко показати, що цей постулат фактично стосується квантування кутового моменту атомної системи і тому п'ятий постулат у списку Бора, який стверджує, що кутовий момент електрона має бути кратним сталій $\hbar$, є зайвим.

Насправді постулат про квантування кутового моменту був сформульований незадовго до цього Дж. Нікольсоном, але у дещо іншій формі. У серії статей, опублікованих протягом 1912 року в журналі “Monthly Notices Roy. Astron. Soc.”, Нікольсон, спираючись на модель атома, запропоновану у 1904 році японським фізиком Хентаро Нагаока розвинув теорію спостережуваних ним спектрів астрономічних об'єктів.

У моделі Нагаока атом уподібнювався до планети Сатурн: у центрі атома знаходиться позитивно заряджене ядро, навколо якого обертаються кільця, заповнені електронами. Спектри випромінювання такої системи, які Нікольсон пов'язував з коливаннями електронних кілець, можна було наближено узгодити зі спостережуваними даними, якщо припустити, що кутові моменти кілець кратні сталій Планка. У своїй першій праці Бор дав евристичне обґрунтування цього припущення і в подальшому спирався на нього як на постулат.

У цій статті ми намагатимемося відтворити шлях, яким ішов Нільс Бор до свого відкриття. Ось як про це писав сам Бор: «... *Мої листи до Резерфорда, написані восени 1912 року, відбивають мої невпинні зусилля зрозуміти роль кванта дії в електронній будові атома одночасно з проблемою молекулярного зв'язку та проблемами випромінювання. Однак питання про стійкість атома, яке неминуче виникало, різко збільшувало складність проблем і змушувало шукати більш надійну основу для їх вирішення. Після багатьох спроб використати квантові ідеї більш послідовно і по можливості у строгій формі, ранньою весною 1913-го мені спало на думку, що ключем до розв'язання проблеми стійкості ... можуть бути на диво прості закономірності в оптичних спектрах хімічних елементів*» [1, с. 551–552].

Фізичні передумови теорії Бора

Фізика атомних спектрів започаткована дослідженнями німецького оптика Йозефа Фраунгофера. У 1813–1814 рр. він запропонував завершену конструкцію спектроскопа (з вхідною щілиною, лінзою, призмою і окуляром), яка залишається майже незмінною і до сьогодні. Зазвичай, нагріті тіла мають рівномірний райдужний спектр. Але якщо в полум'я спиртової горілки ввести солі натрію, калію чи інших хімічних елементів, то в спектрах спостерігаються яскраві лінії. Це спектри випромінювання. Якщо світло від нагрітих тіл пропускати через холодні гази, то на фоні неперервного (суцільного) спектра джерела можна спостерігати темні лінії. Це спектри поглинання газів. Такі темні лінії на фоні суцільного сонячного спектра вперше описав Фраунгофер (їх називають лініями Фраунгофера). Його спостереження показали, що наявність тих чи інших ліній і їхнє положення у спектрі не залежить ані від стану атмосфери Землі, ані від особливостей оптичної апаратури, за допомогою якої ці спектри реєструються. Тобто спек-

тральні лінії є притаманною властивістю сонячного світла та атмосфери Сонця.

Через 55 років після Фраунгофера важливе відкриття зробили Г. Р. Кірхгоф та Р. Бунзен. Спостерігаючи одночасно сонячний спектр (лінії поглинання) і спектр спиртової горілки, в полум'я якої посипали кухонну сіль, вони бачили, що положення жовтої лінії у спектрі випромінювання горілки (її спостерігав ще Фраунгофер) збігається з положенням відповідної темної лінії поглинання у сонячному спектрі. Коротка замітка на дві сторінки, написана Кірхгофом у 1859 р. за результатами цих досліджень, містила одразу аж чотири відкриття:

- кожен хімічний елемент має свій неповторний лінійчатий спектр;
- спектральні лінії можна використовувати для аналізу хімічного складу речовин не тільки на Землі, а й на далеких зірках;
- Сонце складається з розжареного ядра і відносно холодної атмосфери;
- в атмосфері Сонця є водень, натрій та інші відомі на Землі хімічні елементи.

У другій половині XIX ст. з'явилося багато праць, присвячених дослідженню спектрів різноманітних речовин. Протягом п'ятдесяти років (1860–1911) було спостережено і виміряно близько 120 000 спектральних ліній в інтервалі довжин хвиль від 200 до 700 нанометрів. Одночасно робилися спроби знайти певні закономірності в їх розташуванні, проте без суттєвого успіху.

Сільський вчитель із Швейцарії Йоган Бальмер (заради справедливості скажемо, що Бальмер викладав ще й в Базельському університеті, а ступінь доктора філософії отримав у 24 роки), у вільний від основної роботи час, жонглюючи цифрами – довжинами хвиль у спектрах хімічних елементів, які друкувалися у наукових журналах, – помітив, що довжини хвиль у видимій ділянці спектра водню укладаються в лаконічну формулу:

$$\lambda_n = b \frac{n^2}{n^2 - 4}, \text{ де } n = 3, 4, \dots - \text{цілі числа, } b -$$

стала, що дорівнює $3645,6 \text{ \AA}$.

Відкриття Бальмера сталося 1885 року. Через 23 роки швейцарський фізик-теоретик Вальтер Рітц узагальнив формулу Бальмера, надавши їй такого вигляду:

$$\nu_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m + 1, m + 2, \dots, \quad (1)$$

де $R = 4c/b$ – стала Рідберга, c – швидкість світла у вакуумі.

Потреба у такому узагальненні виникла після того, як було відкрито послідовність спектральних ліній в ультрафіолетовому діапазоні – серію Лаймана (1906). Частоти цієї серії можна отримати з формули Рітца при $m = 1$, а частоти серії Бальмера – при $m = 2$. На основі формули Рітца було теоретично передбачено існування ще однієї спектральної серії в інфрачервоному діапазоні ($m = 3$). Невдовзі (1908 р.) таку серію було відкрито Фрідріхом Пашеном.

Наприкінці XIX ст. було отримано досить точні експериментальні результати про теплове випромінювання нагрітих тіл. Проте спроби теоретично описати експериментальну криву залежності спектральної густини енергії випромінювання від частоти (або довжини хвилі) засобами класичної фізики зазнавали фіаско. Наприкінці 1900 р. Макс Планк висунув революційну ідею: нагріта речовина поглинає і випромінює енергію не неперервно, а дискретними порціями – **квантами**: мінімальна енергія електромагнітного випромінювання, яку може поглинати або випромінювати речовина, дорівнює $\varepsilon_0 = h\nu$, де h – універсальна стала – **квант дії**, що дорівнює $6,626 \dots 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$. На основі цієї гіпотези Планк отримав формулу, яка ідеально збігалася з експериментальними даними.

Ідею про кванти енергії А. Ейнштейн 1905 року застосував до явища фотоефекту, яке на той час було досить добре вивчено експериментально завдяки дослідженням Ф. Ленарда. Проста формула Ейнштейна

$$h\nu = \frac{m_e V^2}{2} + U,$$

де $h\nu$ – енергія електромагнітного випромінювання, яку поглинає атом, U – робота виходу електрона з металу (або енергія іонізації у випадку фотоефекту на атомах), а $m_e V^2 / 2$ – кінетична енергія фотоелектронів, e , по суті, законом збереження енергії при фотоефекті. Але вона якісно пояснювала залежність величини фотоструму від частоти світла, а також існування «червоної межі» фотоефекту.

Теорія водневоподібних атомів. Обрахунок сталої Рідберга

Багатий експериментальний матеріал про атомні спектри, евристична формула Бальмера-Рітца, ідея квантів М. Планка та формула Ейнштейна, відкриття атомного ядра і «планетарна» модель Е. Резерфорда – ось та база, на яку спиралася теорія Бора. Зазначимо, що ключову роль тут

відіграла саме формула Бальмера-Рітца. Бор неодноразово говорив, тільки-но він побачив цю формулу, йому відразу все стало зрозумілим. Справді, домноживши праву та ліву частини формули (1) на сталу Планка, ми отримуємо другий постулат Бора, при цьому енергія стаціонарного стану виражатиметься простою формулою:

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}.$$

Завданням Бора було обчислити сталу Рідберга в термінах механічних величин, що визначають рух електрона при заданій енергії.

Задача про рух зарядженої частинки в кулонівському потенціалі добре вивчена, оскільки вона еквівалентна задачі Кеплера про рух планет у полі тяжіння Сонця. При розв'язанні цієї задачі важливу роль відіграють два закони збереження – **закон збереження енергії та кутового моменту**. Величини, що зберігаються, називають інтегралами руху. Кутовий момент є векторною величиною і йому відповідають три інтеграли руху. Якщо фіксувати напрям кутового моменту, то рух відбуватиметься в площині, яка до нього перпендикулярна (площина екліптики в Сонячній системі). Звужена на цю площину механічна система матиме два ступені вільності і два інтеграли руху – енергію і величину (модуль) кутового моменту. Фіксація цих величин означає фіксацію початкових умов, а отже, вибір конкретної траєкторії руху. Якщо фіксувати тільки енергію,

$$E = \frac{m_e V^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = \text{const}, \quad (2)$$

то матимемо набір еліптичних траєкторій, який буде запараметризований допустимими значеннями кутового моменту. Серед цих траєкторій є коло: ця траєкторія відповідає максимальному (при заданій енергії) значенню кутового моменту:

$$L = m_e r V = m_e r^2 \Omega = \text{const}, \quad (3)$$

де  – кутова швидкість. У випадку колового руху рівняння Ньютона має простий вигляд:

$$m_e r \Omega^2 = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (4)$$

і дає співвідношення між кутовою швидкістю і радіусом орбіти. Якщо його підставити у вираз для енергії, то матимемо:

$$E = -\frac{Ze^2}{2r}. \quad (5)$$

З другого боку, третій постулат Бора стверджує, що стаціонарним станам відповідають енергії

$$E_n = -\frac{n\hbar\Omega}{2}. \quad (6)$$

Прирівнюючи вирази (5) і (6), отримуємо формулу квантування радіуса колової орбіти:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 m_e},$$

а підстановка цього виразу у формулу (5) дає квантування енергії:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (7)$$

Отже, стала Рідберга виражається через заряд та масу електрона, заряд ядра та сталу Планка:

$$R = \frac{Z^2 e^4 m_e}{4\pi\hbar^3}.$$

Як зазначалося, умова (6) еквівалентна умові квантування кутового моменту. Справді, якщо

вираз $r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 m_e}$ підставити у формулу (3) і

взяти до уваги співвідношення (4), то отримаємо, що $L = n\hbar$. Оскільки у випадку колового руху енергія зв'язана з кутовим моментом простим

співвідношенням $E = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2L^2}$, то умова

квантування кутового моменту відразу дає формулу (7).

Звичайно, Н. Бор усвідомлював недоліки своєї теорії. Зокрема, його турбував притягнутий ад hoc постулат про зв'язок енергії стаціонарних станів з класичною частотою обертання електрона навколо ядра (або еквівалентний постулат про квантування кутового моменту). У третьому розділі своєї праці він наводить міркування, які мали б обґрунтувати ці припущення.

Бор розглядає стаціонарні стани з досить великим значенням числа n і квантові переходи у стани $n-k$, де $k \ll n$, $k = 1, 2, \dots$. При фіксованому n частоти цих переходів даються за формулою:

$$\omega_{n-k,n} = R \left(\frac{1}{(n-k)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx \frac{2kR}{n^3} = \frac{2k|E_n|}{n\hbar}.$$

Як бачимо, частоти лінійно залежать від k , тобто спектр має осциляторний характер. У цьому випадку, відповідно до гіпотези План-

ка, маємо покласти $\omega_{n-k,n} \approx k\omega_0$, де ω_0 – власна (тобто класична) частота осцилятора. У ролі такої частоти у випадку обертового руху виступає частота Ω_n , яка відповідає стаціонарному стану з енергією E_n . Отже, отримуємо співвідношення:

$$\Omega_n = \frac{2|E_n|}{n\hbar},$$

яке збігається з умовою (6).

Наведене вище обґрунтування умови (6) – яскравий приклад міркувань, що згодом були узагальнені Бором і підняті до рівня універсального принципу квантової фізики – **принципу відповідності**. Суть цього принципу полягає в тому, що закони нової (квантової) механіки не повинні суперечити законам класичної механіки у тих ситуаціях, де класичні уявлення фізично вмотивовані. У задачі про атом класична картина має сенс, коли енергія електрона наближається до енергії іонізації; тоді відстані між енергетичними рівнями прямують до нуля, а величину

$$\frac{n-k}{n} \text{ при } n \gg k \text{ можна вважати рівною одиниці.}$$

Саме за цих умов може бути обґрунтована формула (6). Але Бор переносить її на всі інші стани, зокрема на основний стан ($n=1$), і формулює такий висновок: «У будь-якій молекулярній системі, яка складається з позитивно заряджених ядер і електронів... момент імпульсу кожного електрона в основному стані буде до-

рівнювати величині $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, де h – стала

Планка [7]. Як виявилось, досить скоро, це твердження не відповідає дійсності: всі атомні системи в основному стані мають **нульовий момент імпульсу**. Цей факт не можна пояснити на основі теорії Бора, чи будь-якої іншої теорії, яка оперує класичними уявленнями про механічний рух.

Квазікласичне квантування А. Зомерфельда

Суттєвий крок в осмисленні теорії Бора та її узагальненні на випадок систем з багатьма ступенями вільності зробив Арнольд Зомерфельд. Саме він сформулював умови **квазікласичного** квантування у досить загальній формі – як умову цілочисельності змінних «дія» – адіабатичних інваріантів механічної системи. У випадку квазіперіодичного руху змінні «дія» виражаються у вигляді інтегралів із замкнених циклів у фазовому просторі

рі класичної механічної системи. У цьому випадку умови квантування Зомерфельда мають вигляд:

$$J_\gamma = \frac{1}{2\pi} \oint_\gamma \sum_{i=1}^N p_i dq_i = n_\gamma \hbar, \quad n_\gamma = 1, 2, \dots, \quad (8)$$

де q_i та p_i – канонічні координати у фазовому просторі механічної системи, яка характеризується гамільтоніаном $H(q, p)$, N – кількість ступенів вільності, γ – замкнений контур (цикл) на гіперповерхні фіксованої енергії $E = H(q, p)$. Згідно з теорією Зомерфельда, умов квантування має бути стільки, скільки незалежних змінних «дія» допускає дана механічна система. Очевидно, що ця кількість не перевищує кількість ступенів вільності.

У випадку систем з одним ступенем вільності і стандартним гамільтоніаном

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + U(q),$$

маємо: $p = \sqrt{2mE - U(q)}$. Тоді умова (8) дає правило квантування енергії. Зокрема, для гармонічного осцилятора, коли $U(q) = m\omega_0^2 q^2 / 2$, єдиний замкнений контур у фазовому просторі, яким при заданій енергії рухається система, є

еліпсом з напівосями $a = \sqrt{2mE}$, $b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$.

Інтеграл дії за формулою (8) легко обчислюється:

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = \frac{1}{2\pi} \iint dp dq = \frac{ab}{2} = \frac{E}{\omega_0}.$$

Як і слід було очікувати, умова Зомерфельда дає планківське квантування енергії осцилятора: $E_n = n\hbar\omega_0$.

Якщо спробувати прослідкувати генезис ідеї Зомерфельда, то ми неодмінно маємо звернутися до доповіді Планка на першому Сельвейському конгресі у 1911 році, яка мала промовисту назву: «Закони теплового випромінювання і гіпотеза елементарного кванта дії» [4]. Звернемо увагу: не гіпотеза кванта енергії, а саме кванта дії! У своїй доповіді Планк пропонує глибоку ідею **квантування фазового простору** – розбиття його на області (комірочки) мінімального об'єму, що дорівнює сталій h :

$$\iint dq dp = h. \quad (9)$$

Сьогодні таке розбиття є стандартною процедурою, основою квантової статистики. Але у 1911 р. серед учасників Конгресу, можливо, тільки А. Пуанкаре зрозумів глибину ідеї. (Про це свідчить дискусія після доповіді Планка.) З ви-

соти нинішніх знань ми можемо побачити принцип невизначеності, захований у співвідношенні (9). Якщо ж інтеграл (9) застосувати до замкнених областей, обмежених контуром γ , і перетворити за формулою Стокса, то отримаємо умови квантування Зомерфельда!

Статтю А. Зомерфельда «Квантова теорія спектральних ліній» було опубліковано в журналі *Annalen der Phys.* на початку 1916 року. В ній загальна теорія була застосована до атома водню, а якщо говорити мовою класичної фізики, — до задачі Кеплера. Механічна система, що відповідає цій задачі, має три ступені вільності, отже, умов квантування має бути три. Дві з них стосуються руху у площині екліптики (напрямок кутового моменту фіксований). Звужений на площину гамільтоніан системи в полярних координатах має вигляд:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{r}, \quad (10)$$

де $p_r = m_e \dot{r}$ — радіальний імпульс, $p_\phi = m_e r^2 \dot{\phi} = L$ — кутовий момент. У чотири-вимірному фазовому просторі механічної системи з гамільтоніаном (10) маємо два замкнені цикли. Один із них лежить у площині змінних ϕ, p_ϕ і є колом. Умови квантування відповідної змінної «дія» є по суті квантуванням кутового моменту:

$$J_\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} p_\phi d\phi = L = n_\phi \hbar. \quad (11)$$

Інший цикл лежить у площині змінних r, p_r . Відповідна змінна «дія» легко обчислюється [4]:

$$J_r = -L + \frac{Zm_e e^2}{\sqrt{2m_e |E|}} = n_r \hbar. \quad (12)$$

Отже, у випадку довільних траєкторій (а не тільки колових) маємо два незалежні квантові числа: n_ϕ і n_r . Це означає, що кутовий момент і енергія квантуються незалежно. Якщо допустити значення кутового моменту з формули (11) підставити у формулу (12), то отримаємо:

$$|E| = \frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2 (n_r + n_\phi)^2}.$$

Ця формула збігатиметься з формулою (7), якщо покласти $n = n_r + n_\phi$. Від часів Зомерфельда число n_r називають радіальним, а число n — головним квантовим числом.

Принципово новим моментом у теорії Зомерфельда було квантування проекції кутового моменту на напрям зовнішнього магнітного поля. Це квантування пов'язане з існуванням третьої змінної «дія», яка і є проекцією кутового момен-

ту: $J_g = L_z = m\hbar$. Квантове число m , яке при цьому виникає, дістало назву магнітного квантового числа.

Після праць Зомерфельда теорія квазікласичного квантування, започаткована Н. Бором, набула завершеності й у такому вигляді зберігає свою значущість до наших днів. Правда, самі умови (8) дещо модифікуються. У працях В. П. Маслова та І. В. Арнольда було показано, що цілі числа n_γ в умовах квантування (8) мають бути певним чином «підправлені» деякими топологічними індексами, які суттєво залежать від геометрії циклів γ . У такий спосіб при квантуванні осци-

лятора з'являється доданок $\frac{1}{2}$, а у випадку куто-

вого моменту умови квантування записуються не у вигляді інтегралів за циклами, а через поверхневі інтеграли (формула Стокса): тоді отримуємо правильну формулу для допустимих значень квадрата кутового моменту: $L^2 = \hbar l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$.

Нова квантова механіка

Незважаючи на значні успіхи, які мала теорія Бора в поясненні спектрів водневоподібних атомів, багато фізиків того часу, та і сам Бор, розуміли її обмеженість. Спектри хімічних елементів з великою кількістю електронів вже не мали простих закономірностей і не піддавалися теоретичному опису. Теорія Бора не могла нічого сказати про інтенсивності випромінювання, оскільки в ній квантові переходи між стаціонарними станами постулювалися як «скачки» і не пропонувалося жодних динамічних рівнянь, які б описували ці процеси. Можна сказати, що на початку 20-х років минулого століття потенціал теорії Бора було вичерпано. Ось як про це писав свідок і учасник цих подій Луї де Бройль: «У 1923 р. стало майже ясно, що теорія Бора і стара теорія квантів лише проміжна ланка між класичними уявленнями і якимись зовсім іншими поглядами, що дозволять глибше зрозуміти суть квантових явищ... Ставало чимраз очевидніше, що потрібно побудувати нову механіку, де квантові ідеї увійдуть в саму основу теорії, а не будуть додані до неї наприкінці, як це робилося у старій теорії квантів» [3, с. 102–119].

Подальший розвиток подій навколо вивчення атома був бурхливим і перехоплював подих. Програма створення нової теорії почала реалізовуватися майже одночасно двома різними і, як здавалося спочатку, ніяк не пов'язаними між собою шляхами. Перший напрям, який започатку-

вала справді революційна ідея де Бройля про хвильові властивості матерії, привів до створення хвильової механіки Шредінгера.

Іншим шляхом пішов В. Гейзенберг. Його ідеї були ще більш революційними. У статті «Про квантотеоретичну інтерпретацію механічних співвідношень», яку вважають початком нової квантової механіки (подана до друку у липні 1925 р.), він фактично заперечив спроможність уявити й описати квантовий об'єкт мовою класичних понять, таких як координата, траєкторія, імпульс тощо, оскільки усі ці величини є **принципово не спостережуваними**, наприклад для електрона в атомі. Замість класичних понять Гейзенберг пропонує концепцію **квантових динамічних змінних (квантових спостережуваних)** – математичних за своєю природою сутностей, для яких визначені правила додавання, множення на числа та множення цих об'єктів між собою. Проте тепер операція множення не є комутативною ($A \cdot B \neq B \cdot A$). Міра некомутативності квантових динамічних змінних задається комутаційними співвідношеннями, які, власне, і є основними рівняннями квантової теорії. Безпосередньо вимірювані в експерименті фізичні величини – це середні (або очікувані) значення квантових спостережуваних: для їх обчислення формулюються певні правила, подібні до правил знаходження матричних елементів у теорії матриць. Але тепер одній квантовій динамічній змінній можна зіставити безліч класичних величин – очікуваних значень. Будь-яка з цих величин може бути виміряна у конкретному експерименті з певною ймовірністю залежно від **стану** системи. (Поняття стану було, очевидно, запозичено з теорії Бора.)

За щасливою випадковістю рецензентом статті Гейзенберга мав бути Р. Фаулер – фактичний керівник 23-річного стипендіата коледжу Святого Іоана (Кембридж) Поля Дірака. Як це часто буває, науковий керівник доручає своєму аспірантові розібратися в незрозумілій для нього статті й підготувати відгук. Суть статті Дірак зрозумів одразу. Він заповнив деякі логічні прогалини у викладенні Гейзенберга і, що важливо, перевів введені Гейзенбергом інтуїтивні поняття «квантових спостережуваних» на тверду математичну основу, а їх некомутативність на основі принципу відповідності Бора пов'язав з дужкою Пуассона у класичній механіці. Стаття Гейзенберга і стаття Дірака «Фундаментальні рівняння квантової механіки» вийшли друком майже одночасно – наприкінці 1925 року. Ці дві статті, а також наступні статті Гейзенберга, Борна та Йордана, прийнято вважати початком нової квантової механіки.

Статтю Шредінгера «Квантування як задача на власні значення» було опубліковано у лютому 1926 року. У цій праці ключовим фігурувало поняття **хвильової функції** і диференціальне рівняння для неї – рівняння Шредінгера. Ця функція по суті була узагальненням хвилі де Бройля: її просторовий розподіл (а точніше, розподіл модуля цієї комплекснозначної функції) давав уявлення про місцезнаходження та рух квантової частинки. Як бачимо, Шредінгер, як і Гейзенберг, відмовлялися від класичних понять при описі квантових об'єктів. Як приклад ефективності нової теорії, було розв'язано задачу про атом водню. Цей розв'язок Шредінгера в майже незміненому вигляді сьогодні подається в усіх підручниках з квантової механіки. Справедливості заради слід сказати, що цю ж задачу було розв'язано Гейзенбергом і В. Паулі методами матричної квантової механіки за місяць до появи статті Шредінгера.

Спочатку дві теорії – хвильова теорія Шредінгера і операторна (за сучасною термінологією) Гейзенберга – здавалися абсолютно різними і не пов'язаними між собою. Але дуже скоро, наприкінці 1926 р., Шредінгер помітив, що ключове комутаційне співвідношення теорії Гейзенберга

$$\hat{X}_n \cdot \hat{P}_m - \hat{P}_m \cdot \hat{X}_n = i\hbar \delta_{nm},$$

яке виражає некомутативність оператора координати та імпульсу і забороняє можливість їх одночасного точного вимірювання (операторна форма принципу невизначеності) може бути «розв'язаним», якщо $\hat{X}_n$ реалізувати як оператор множення на незалежну змінну x_n – один із аргументів хвильової функції: $\hat{X}_n \psi(x_1, x_2, x_3) = x_n \psi(x_1, x_2, x_3)$. Тоді оператор імпульсу буде пропорційним частинній похідній за відповідним аргументом:

$$\hat{P}_n \psi(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_n} \psi(x_1, x_2, x_3).$$

Якщо у класичному гамільтоніані
$$H(x, p) = \frac{\sum p_n^2}{2m} + U(x)$$
 класичні імпульси P_n замінити квантовими операторами $\hat{P}_n = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_n}$, то отримаємо квантовий гамільтоніан, який фігурує у правій частині рівняння Шредінгера. При цьому хвильова функція Шредінгера пов'язана зі стаціонарними станами теорії Гейзенберга унітарним перетворенням:

$$|\psi(x, t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) |\psi(x, 0)\rangle.$$

Таким чином було встановлено еквівалентність двох теорій – Шредінгера і Гейзенберга. Хоча насправді треба казати, що теорія Шредінгера – це певний вибір представлення комутаційних співвідношень в більш загальній теорії Гейзенберга.

Створення нової квантової механіки протягом одного року здається дивом. Але це «диво» сталося тому, що добре продуману фізичну картину було «влито» у вдало знайдену математичну форму. Це повчальний досвід, який свідчить, що принципово нові фізичні теорії вимагають залучення нової математики.

Варто згадати ще два сюжети в цій історії. У 1927 р. В. Паулі побудував математичну теорію спіна електрона і обґрунтував свій евристичний «принцип заборони», який вже декілька років успішно використовували фізики. У 1928 р. П. Дірак написав своє знамените рівняння для релятивістського електрона, а за рік до цього проквантував електромагнітне поле. Квантова теорія набула елегантного і «майже» завершеного вигляду. Залишалися проблеми інтерпретації і правильного прочитання отриманих формул. Але молодих прагматиків ці проблеми не дуже хвилювали. Вони розширювали сферу застосувань квантової теорії на фізику магнітних явищ, кристалічні тверді тіла, ядерну фізику.

Нільс Бор не залишався осторонь цих проблем. Він старанно збирав під своє крило талановиту молодь, надавав матеріальну підтримку та можливість випробувати найсвіжіші ідеї. Він чесно визнавав переваги багатьох своїх учнів, зокрема в математичній підготовці, але сприймав нове з великим ентузіазмом. Усі знали, що красиву ідею Бор глибоко зрозуміє, підтримає і полюбить не менше за самого автора. Лише за кілька років, між серединою 1920-х та початком 1930-х, Бор набув (і вже до кінця життя зберіг) слави лідера всього нового і живого у фізиці, а копенгагенський інститут до самої його смерті (1962) залишався фізичною Меккою.

Можна з упевненістю стверджувати, що постать Нільса Бора є фундаментальною не стільки завдяки його науковим здобуткам, і навіть не через його дбайливе, уважне і батьківське ставлення до численних учнів і їхніх нових ідей. Його можна назвати Великим Примирювачем, людиною, яка змогла досягти велич ідей своїх колег і вчасно авторитетно сказати – «і ти маєш рацію, і ти...», що замість роз'єднання умів врешті спричинило неймовірний прогрес. Нільс Бор визнаний світовою спільнотою як один із стовпів фізики XX століття. Людство вдячне йому. Його портрет зображено на монетах та грошових купюрах. Його ім'ям названо дуже солідну наукову нагороду та один із найновіших елементів періодичної таблиці.

Список літератури

1. Бор Н. Избранные научные труды: в 2 т. / Н. Бор. – М.: Наука, 1971. – Т. II. – 675 с.
2. Бройль Л. де Революция в физике / Л. де Бройль. – М.: Атомиздат, 1963. – 232 с.
3. Зомерфельд А. Строение атома и спектры / А. Зомерфельд. – М.: ГИТТЛ, 1956. – Т. I. – 591 с.
4. Планк М. Законы теплового излучения и гипотеза элементарного кванта действия / М. Планк // Избранные труды. – М.: Наука, 1975. – 788 с.
5. Пуанкаре А. Ценность науки / А. Пуанкаре // О науке / А. Пуанкаре. – М.: Наука, 1983. – 560 с.
6. Bohr N. On the constitution of atoms and molecules / N. Bohr // Philos. Mag. – 1913. – Vol. 26, P. 1–24. (Бор Н. Избранные научные труды / Н. Бор. – М.: 1970. – Т. I. – С. 84–106).
7. Rutherford E. The Scattering of α - and β -Particles by Matter and the Structure of the Atom / E. Rutherford // Philos. Mag. – 1911. V. 6. – P. 669–688.

P. Holod, Yu. Terent'eva

QUASICLASSICAL ATOM MODEL (ON CENTENARY OF THE BOHR ATOM MODEL)

We present the historical context when N. Bohr formulated his atom model. Then we review a further development of quantum conceptions from quasiclassical quantization to modern quantum mechanics.

Keywords: Bohr atom, atomic spectrum, Rydberg constant, *quasiclassical quantization*.

Матеріал надійшов 12.04.2013